

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS

UNIDAD DE POSGRADO

Magnetoresistencia del grafeno

TESIS

Para optar el Grado Académico de Magister en Ciencias Fisicas con
Mencion en Fisica del Estado Solido

AUTOR

Abraham Pablo Aslla Quispe

ASESOR

Pablo Hector Rivera Riofano

Lima – Perú

2014



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, Decana de América)
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

UNIDAD DE POSGRADO

ACTA DE SUSTENTACION DE TESIS PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAGÍSTER EN FÍSICA CON MENCIÓN EN FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO

A los diecisiete días del mes de julio del año dos mil catorce, siendo las tres de la tarde, se reunió el Jurado Examinador, en el auditorio #109 de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, presidido por el señor Doctor Justo Alcides Rojas Tapia como presidente, y con la asistencia de los siguientes miembros del Jurado Examinador:

Dr. Pablo Héctor Rivera Riofano	(Asesor)
Dr. Carlos Landauro Sáenz	(Miembro)
Dr. Jaime Francisco Vento Flores	(Miembro)
Dr. Justiniano Quispe Marcatoma	(Miembro)

Para la sustentación oral y pública del trabajo de Tesis para optar el Grado Académico de Magister en Física con mención en Física del Estado del Estado Sólido, del bachiller **Aslla Quispe Abrahan Pablo** con código N° 09137005.

Después de darse lectura al expediente de Grado en el que consta haberse cumplido con todas las disposiciones reglamentarias, los señores Miembros del Jurado, atendieron a la exposición de la Tesis titulada: "**Magnetoresistencia del Grafeno**".

Y formuladas las preguntas, éstas fueron absueltas por el graduando.

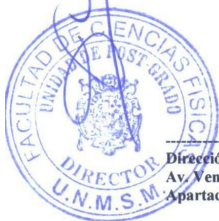
Acto seguido, en privado, el Jurado Examinador procedió a la calificación. El Presidente determinó el promedio de la calificación, obteniendo como resultado de:

Diecinueve (19) Excelente

Continuación el Presidente del Jurado recomienda que la Facultad proponga que se le otorgue el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido, al bachiller **Aslla Quispe Abrahan Pablo**.

Siendo las cuatro con cuarenta y cinco minutos, se levantó la sesión; recibiendo el graduando las felicitaciones de los señores Miembros del Jurado y público asistente.

Los Miembros del Jurado Examinador suscriben el Acta de sustentación de tesis en Lima, a los diecisiete días del mes de julio del año dos mil catorce.



Dirección: ciudad Universitaria, Pabellón de Ciencias Físicas
Av. Venezuela Cdra 34, Lima 1
Apartado Postal: 14-0149 - Lima 14 Perú

Unidad de Posgrado
Teléfono: 619-7000 Anexo 3802
Email: postfis@unmsm.edu.pe

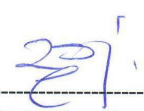


UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, Decana de América)
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
UNIDAD DE POSGRADO

... Acta de sustentación de Tesis...


Dr. Justo A. Tapia Rojas
Presidente




Dr. Carlos Landauro Sáenz
Miembro


Dr. Jaime Vento Flores
Miembro


Dr. Justiniano Quispe Marcatoma
Miembro


Dr. Pablo Héctor Rivera Riofano
Asesor

A Marisol y Albert

Agradecimientos

A mi asesor el Dr. Pablo Hector Rivera Riofano por la confianza y el apoyo incondicional que permitió desarrollar esta aventura intelectual.

A la Asociación Familia Zuñiga y Rivero por el apoyo económico mediante el Programa de Becas para Tesis de Maestría en la Facultad de Ciencias Físicas de la UNMSM.

A los docentes de la Unidad de Posgrado de Física de la UNMSM por su paciencia y dedicación al desarrollo científico del país.

A la comunidad científica de Físicos en todo el mundo que me permitió acceder a información valiosa y libre para desarrollar el presente trabajo, así como a la comunidad de software libre que hizo posible los proyectos GNU.

Abrahan.

Resumen

En el presente trabajo se exponen las herramientas utilizadas en el estudio de la estructura de bandas del grafeno y nanoribbons de grafeno con condiciones de borde zigzag (ZGNR), armchair (AGNR) y barbados (bearded) dentro del modelo del enlace fuerte (*tight-binding*). El transporte electrónico en nanodispositivos de grafeno se describe dentro del formalismo de Landauer y Landauer-Büttiker, dentro de las cuales usamos como herramienta principal las funciones de Green. Consideramos que cada nanodispositivo se encuentra formado por el nanodispositivo conectado a contactos semi-infinitos ideales, reduciendo en estos casos el efecto de los contactos mediante el uso de las autoenergías que se calculan usando las funciones de Green de los contactos. Los contactos de los nanodispositivos se consideran formados por cadenas verticales, donde cada cadena interactúa con las cadenas paralelas y vecinas, esta propiedad permite utilizar el método recursivo de convergencia rápida para el cálculo de las funciones de Green de los contactos y el método de Decimación para el cálculo de la función de Green de los nanodispositivos. Evaluamos la estructura de bandas y la conductancia eléctrica de los nanoribbons de borde zigzag, borde armchair y borde bearded, encontrando que los nanoribbons ZGNR tienen comportamiento conductor, los nanoribbons AGNR tienen comportamiento semimetálico si $M = (N + 1)/3$ (con N número de dímeros por cadena unidad) es un número entero y en caso contrario los nanoribbons AGNR tienen comportamiento semiconductor donde el gap de energía prohibida ΔE tiene relación inversa con el ancho del nanoribbons. Los nanoribbons de borde bearded tienen comportamiento conductor al igual que los nanoribbons ZGNR, en cambio los nanoribbons de borde mixto zigzag y bearded tienen comportamiento semiconductor, donde el gap de energía prohibida disminuye a medida que aumenta el ancho del nanoribbons. Analizamos también el transporte electrónico en nanoporos rectangulares en redes cuadradas y en redes de grafeno, calculando así mismo el efecto sobre el transporte electrónico originadas por moléculas de diferentes configuraciones ubicadas en el centro de los nanoporos, los resultados muestran que las moléculas producen la presencia de resonancias y antiresonancias en diferentes valores de energía

que son característicos para cada tipo de molécula en el espectro de coeficientes de transmisión, estas resonancias y antiresonancias son evaluadas en términos de variación del coeficiente de transmisión.

Palabras clave: Grafeno, tight-binding, transporte cuántico, transporte balístico, funciones de Green, fórmula de Landauer, nanoribbons, nanopores

Abstract

In this work we show the tools used to study the band structure of graphene and graphene nanoribbons with zigzag edge (ZGNR), armchair (AGNR) and bearded within the tight-binding model. The electronic transport in graphene nanodevices is described within the Landauer and Landauer -Büttiker formalism, within we use as main tool the Green's functions. We take in consideration that each nanodevice is formed by the nanodevice connected to ideal semi-infinite contacts, in such cases we reduce the effect of contact by using the self-energy that are calculated using the contacts Green's functions. The contacts of nanodevices are formed by vertical chains, each chain interacts with the parallel and neighbors chains, this property allows to use the recursive method for quickly calculate the Green's functions of contacts and the decimation method for the calculation of the nanodevices Green's function. We evaluate the band structure and electric conductance of nanoribbons with zigzag, armchair and bearded edges, finding that the ZGNR nanoribbons have conductor behavior, AGNR nanoribbons have semimetallic behavior if $M = (N + 1)/3$ (with N number of dimers per chain unit) is an integer and otherwise the AGNR nanoribbons are semiconducting behavior where the energy gap ΔE are inversely related to the nanoribbons width. The bearded nanoribbons have conductor behavior as the ZGNR nanoribbons, however nanoribbons with mixed edge zigzag and bearded have semiconducting behavior, where the energy gap decreases as the width nanoribbons increases. We also study the electronic transport in rectangular nanopores on square networks and graphene, we calculate too the effect on the electron transport induced by different molecules located in the center of the nanopores, the results show that the presence of molecules produce resonances and antiresonances in different energy values that are characteristic for each molecule type in the transmission profile, these resonances and antiresonances are evaluated in terms of variation of the transmission coefficient.

Keywords: Graphene, tight-binding, Quantum transport, Ballistic transport, Green's functions, Landauer formulae, nanoribbons, nanopores

Índice general

1. Introducción	1
2. Grafeno	6
2.1. Consideraciones de red	6
2.2. Estructura de bandas	7
2.3. Aproximación en puntos de Dirac	10
2.4. Grafeno en un campo magnético uniforme	13
2.5. Mariposa de Hofstadter	16
2.5.1. Red cuadrada finita en campo magnético uniforme	16
2.5.2. Red ladrillo finito en campo magnético uniforme	19
2.6. Mariposa de Hofstadter para redes infinitas	21
2.6.1. Red cuadrada	21
2.6.2. Grafeno	23
3. Transporte electrónico	26
3.1. Formalismo de Landauer	27

3.2.	Formalismo de la función de Green	29
3.2.1.	Función de Green	30
3.2.2.	Funciones de Green fuera de equilibrio	31
3.2.3.	Coeficiente de transmisión y la función de Green	34
3.2.4.	Método de decimación	36
3.2.5.	Funciones de Green de contacto derecho	39
3.3.	Formalismo de Buttiker para 4 contactos	42
4.	Nanoribbons de grafeno	48
4.1.	Estructura electrónica de nanoribbons de grafeno zigzag	50
4.1.1.	Método del <i>tight-binding</i>	52
4.2.	Estructura electrónica de nanoribbons Armchair	54
4.2.1.	Método del <i>tight-binding</i>	57
4.3.	Nanoribbons barbados (bearded)	59
4.4.	Nanoribbons zizag-bearded	61
4.5.	Conductancia eléctrica	62
4.6.	Nanoribbons en campo magnético	68
5.	Nanoporos	75
5.1.	Nanoporos en red cuadrada	77
5.1.1.	Modelo	78
5.1.2.	Resultados y discusión	82

5.2. Nanoporos de grafeno	89
5.2.1. El modelo	90
5.2.2. Resultados y discusión	93
6. Conclusiones	101
. Bibliografía	104
A. Relaciones importantes	112
A.1. Elementos de matriz para el hamiltoniano del grafeno	112
A.2. Relación de dispersión $ f(\mathbf{k}) $	114

Capítulo 1

Introducción

En el desarrollo de la industria de los semiconductores de silicio, los circuitos integrados consisten de transistores, que hacen que el estudio de la electrónica y microelectrónica tenga importancia cada vez mayor, áreas en el que el transporte de electrones se describe por características estadísticas promedias, siendo las cantidades físicas utilizadas cantidades macroscópicas, ello debido a que el tamaño de los dispositivos es mucho mayor que la longitud de coherencia de fase de los estados electrónicos. De acuerdo a la ley de Moore el número de transistores por unidad de área en un circuito integrado se duplica aproximadamente cada dos años, el tamaño de los circuitos integrados caerá a 30 nm en el siglo XXI, tamaño en el que los circuitos integrados ya no pueden ser descritos por leyes macroscópicas, debido a que las características ondulatorias y los efectos cuánticos cobran mayor importancia, hecho que justifica el desarrollo de la nanoelectrónica.

En la naturaleza encontramos que los átomos de carbono constituyen un elemento esencial de la vida en el planeta y la química orgánica, se encuentran formando diferentes compuestos de diferentes estructuras y diferentes propiedades. Así mismo el carbono puro en la naturaleza se encuentra en dos formas: grafito y diamante, que tienen propiedades eléctricas y mecánicas diferentes debido a que sus estructuras cristalinas son diferentes. Mientras el diamante constituido por enlaces híbridos sp^3 , es un material aislante muy duro; el grafito formado por enlaces híbridos sp^2 , es un material conductor y a su vez lubricante. Los primeros alótropos de carbono encontrados artificialmente fueron los fulerenos en 1985, que son moléculas esféricas de átomos de carbono considerados como sistemas cerodimensionales, este descubrimiento

originó una intensa investigación de posibles materiales puros de carbono. En 1991 se realiza el descubrimiento oficial de los nanotubos de carbono con paredes multiples MWCNT y en 1993 nanotubos de carbono monocapa SWCNT, los nanotubos son sistemas unidimensionales, debido a que su relación longitud - radio es muy grande. En el 2004, en la Universidad de Manchester, el grupo liderado por Andrei Geim y Konstantin Novoselov obtuvo experimentalmente, por primera vez, una monocapa de átomos de carbono sobre la superficie de un sustrato de dióxido de silicio SiO_2 [1,2], a esta monocapa se le denomina grafeno. Una sucesión de grafeno forma el grafito, el material más conocido por el hombre desde que se encontraba en las cavernas. La técnica desarrollada por el grupo de Geim es relativamente simple y está considerada dentro de las técnicas de escisión micromecánica, y consiste en pegar una cinta adhesiva sobre un pedazo de grafito de óptima calidad para luego colocarla sobre un sustrato de dióxido de silicio. Luego de una búsqueda con un microscopio óptico y electrónico se detecta el grafeno en monocapas, bicapas y terrazas de varios niveles.



Figura 1: Andre Geim (izquierda) y Konstantin Novoselov (derecha) ganadores del Premio Nobel de Física 2010, por el descubrimiento y caracterización del grafeno.

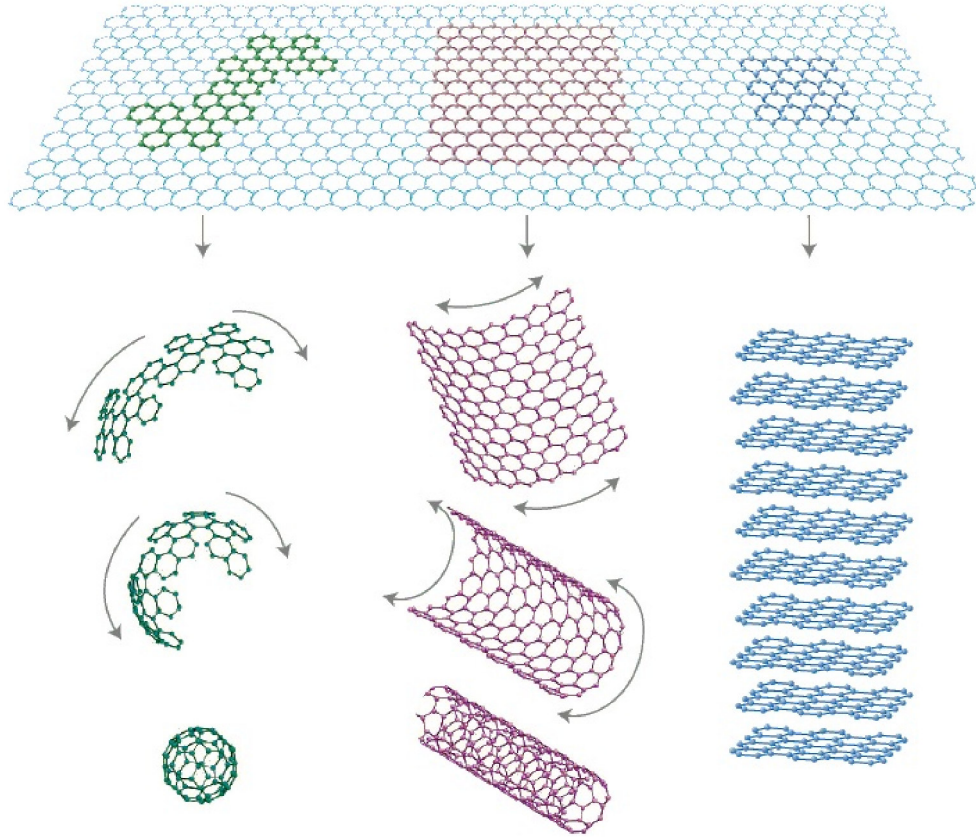


Figura 2: Construcción teórica de otros alótopos del carbono a partir del grafeno: fullerenos (0D), nanotubos (1D) y grafito (3D) [1].

Durante muchos años se presumía que sistemas bidimensionales puros no se encontraban en estado libre en la naturaleza. Opinión que se fundamenta en la argumentación de Landau y Pierls, quienes demostraron que cristales bidimensionales no pueden existir, por ser estas termodinámicamente inestables [3–6], dicha teoría se puso en tela de juicio con el descubrimiento del grafeno en el 2004. Sin embargo se puede considerar que las teorías de Landau y Pierls siguen siendo válidas si se tiene en cuenta que las hojas de grafeno presentan ligeras corrugaciones y defectos en la tercera dimensión y por tanto no son estrictamente bidimensionales [6, 7].

En el grafeno, los átomos de carbono se unen químicamente formando una estructura cristalina bidimensional de tipo hexagonal, que resulta de la hibridación de los orbitales $2s$, con los orbitales $2p_x$ y $2p_y$, que produce tres orbitales híbridos sp^2 que se encuentran en el plano xy formando entre sí 120° . La hibridación sp^2 proporciona la estabilidad de la estructura bidimensional y las propiedades mecánicas del grafeno.

De acuerdo a la propuesta de L. Pauling [8] los tres estados híbridos sp^2 son:

$$|2sp_a^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}|2p_x\rangle \quad (1.1)$$

$$|2sp_b^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|2p_x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2p_y\rangle \quad (1.2)$$

$$|2sp_c^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|2p_x\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2p_y\rangle \quad (1.3)$$

El electrón en el orbital p_z perpendicular al plano de grafeno permanece sin hibridar y le permite al grafeno adherirse al sustrato de SiO_2 mediante fuerzas de Van Der Waals y simultáneamente proporciona al grafeno unas propiedades electrónicas singulares que ha llamado la atención de la comunidad académica mundial y que ha generado una intensa actividad de investigación tanto teórica como experimental.

La estructura electrónica del grafeno dada por los orbitales p_z presenta dos puntos K y K' , en la primera zona de Brillouin, donde las bandas de valencia y conducción coinciden puntualmente, los portadores de carga en dichos puntos no poseen masa y la relación de dispersión de la energía en las proximidades de los puntos K y K' es lineal respecto a la magnitud de vector de onda \mathbf{k} , es decir $E = \pm\hbar k v_F$, donde $v_F \approx 10^6$ m/s, es la velocidad de Fermi, una velocidad que es 0.33 % respecto a la velocidad de la luz, siendo considerado casi relativístico, esta propiedad es una de las razones por el cual se considera al grafeno como el primer material de estado sólido para realizar experimentos de electrodinámica cuántica, que permite probar por ejemplo, la paradoja de Klein. A los puntos K y K' se les denomina puntos de Dirac y a los portadores que se mueven al rededor de dichos puntos se les denomina fermiones de Dirac.

El comportamiento electrónico único del grafeno se debe a las características relativistas cuánticas inusuales de los fermiones de Dirac, estos bajo la presencia de un campo magnético uniforme dan lugar a un espectro de energía particular para cada nivel de Landau [9–12], permiten también la observación del efecto Hall cuántico anómalo a bajas temperaturas [13–15] y a temperatura ambiente [16].

Las redes finitas de grafeno, denominados puntos cuánticos, se caracterizan por el confinamiento de los electrones y los huecos debido al tamaño del sistema. Las colinas, ondulaciones y corrugaciones del grafeno afectan intensamente las propiedades electrónicas de los puntos cuánticos por ello es necesario poseer una lámina de grafeno lo más plana posible cuya obtención ya es posible [17].

En el capítulo 2 describimos la estructura electrónica del grafeno, la aproximación en las proximidades de los puntos de Dirac para evaluar el efecto del campo magnético uniforme sobre el grafeno. Se hace también una revisión de las mariposas de Hofstadter para redes finitas e infinitas en redes cuadradas y el grafeno.

En el capítulo 3 desarrollamos el modelo de Landauer para el transporte electrónico a bajas temperaturas, describimos también la teoría de las funciones de Green para fines de calcular la densidad de estados y la conductancia eléctrica de nanodispositivos, evaluamos métodos numéricos que nos permiten calcular recursivamente las funciones de Green del dispositivo cuántico y de los contactos semi-infinitos, estos son el método de decimación y el método recursivo de convergencia rápida. Finalmente analizamos el formalismo de Landauer-Buttiker para evaluar numéricamente la resistencia Hall de un punto cuántico con cuatro contactos.

En el capítulo 4 aplicamos la ecuación de Dirac para describir los estados de borde en nanoribbons zigzag y armchair, el método del tight-binding para la estructura de bandas de nanoribbons y aplicamos la fórmula de Landauer para evaluar la conductancia eléctrica de los nanoribbons con diferentes bordes. Así mismo analizamos la estructura de bandas de nanoribbons bajo la acción del campo magnético.

En el capítulo 5 aplicamos la formulación de Landauer al estudio de nanoporos de estado sólido construidos en redes cuadradas y el grafeno. Evaluamos también los efectos sobre la conductancia eléctrica producidas por la presencia de moléculas de diferentes configuraciones en el centro de los nanoporos.

Finalmente presentamos el resumen de las principales conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

Grafeno

2.1. Consideraciones de red

El grafeno es una monocapa de átomos de carbono distribuidos en una red cristalina bidimensional de tipo hexagonal, conocido también como panal de abejas. Cada átomo de carbono tiene seis electrones ocupando los orbitales $1s^2$, $2s^2$ y $2p^2$. Los electrones $1s^2$ se encuentran fuertemente ligadas al núcleo atómico debido a su baja energía, por tanto no participan en los enlaces químicos. De los cuatro electrones restantes en los orbitales $2s^2$ y $2p^2$ de mayor energía tres producen enlaces covalentes hibridizados sp^2 , que proporcionan la estabilidad de la estructura hexagonal y hacen que los átomos de carbono se encuentren fuertemente empaquetados [1, 18–20].

Los electrones en los orbitales perpendiculares al plano del grafeno son relevantes para las propiedades de transporte eléctrico, por lo que consideramos solo estas en el cálculo de la estructura de bandas de energía. La estructura hexagonal no constituye una red de Bravais, pero se puede describir por medio de dos redes de Bravais triangulares formada por átomos A ("•") y B ("◦") respectivamente. De acuerdo a la figura 3 los vectores primitivos de cada red triangular del grafeno son dados como:

$$\vec{a}_1 = \sqrt{3}a\hat{x}, \quad \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} + \frac{3}{2}a\hat{y} \quad (2.1)$$

siendo $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = \sqrt{3}a$ la constante de red y $a = 1.42 \text{ Å}$ la distancia entre dos átomos de carbono próximos.

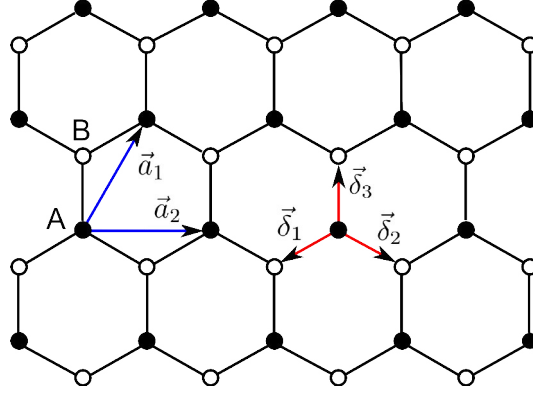


Figura 3: Red cristalina del grafeno, representado por dos redes cristalinas triangulares de átomos A ("•") y B ("o"), donde \vec{a}_1 y \vec{a}_2 son los vectores primitivos de la red real.

Cada átomo de la red A en la posición \mathbf{R}_j^A tiene como vecinos próximos a tres átomos de la red B ubicados en las posiciones $\mathbf{R}_i^B = \mathbf{R}_j^A + \vec{\delta}_j$, $j = 1, 2, 3$. De acuerdo a la figura 3 los vectores $\vec{\delta}_j$ son las posiciones de los átomos B respecto a las posiciones de los átomos A , que se escriben como

$$\vec{\delta}_1 = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{1}{2}a\hat{y}, \quad \vec{\delta}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{1}{2}a\hat{y}, \quad \vec{\delta}_3 = a\hat{y}. \quad (2.2)$$

Así mismo cada átomo de la red B en la posición \mathbf{R}_j^B tiene tres átomos de la red A en las posiciones $\mathbf{R}_i^A = \mathbf{R}_j^B - \vec{\delta}_j$ como vecinos próximos.

En el espacio recíproco, la red recíproca asociada al grafeno es otra red hexagonal, donde vectores primitivos \vec{b}_1 y \vec{b}_2 asociados a \vec{a}_1 y \vec{a}_2 son dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \left(\frac{3}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \left(-\frac{3}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right).$$

2.2. Estructura de bandas

Nuestro propósito es describir el transporte electrónico, por tanto nos centramos en esta parte a la estructura de bandas asociada a los orbitales perpendiculares al plano del grafeno, para tal fin consideramos que los electrones en los orbitales perpendiculares de los átomos en las sub redes triangulares A y B son representados por los estados cuánticos $|\phi_j^A\rangle$ y $|\phi_i^B\rangle$ respectivamente. La interacción entre vecinos próximos ocurre de modo que un electrón del átomo A (o B) pueda saltar a los tres vecinos próximos

B (o A), esta interacción se describe dentro del modelo del *tight-binding*, modelo en el cual el hamiltoniano *tight-binding* en primera cuantización se escribe como [21–23]

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (|\phi_j^A\rangle\langle\phi_i^B| + |\phi_j^B\rangle\langle\phi_i^A|) \quad (2.3)$$

siendo $t = 2.8$ eV el parámetro de Hopping y $\langle i,j \rangle$ una notación que establece que la suma en (2.3) se efectúa solamente sobre los vecinos próximos.

Las funciones de onda que describen a los electrones en la red triangular A/B es dado por

$$\langle \mathbf{r} | \phi_j^{A/B} \rangle = \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{A/B}). \quad (2.4)$$

Siguiendo la propuesta de Wallace [24], las funciones de onda de Bloch ψ_k^A y ψ_k^B asociadas a las redes triangulares A y B se expresan en términos de las funciones de onda de los orbitales atómicos como:

$$\psi_k^A(\mathbf{r}) = \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^A} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^A) \quad (2.5)$$

$$\psi_k^B(\mathbf{r}) = \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^B} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^B) \quad (2.6)$$

teniendo en cuenta (2.4) reescribimos (2.5) y (2.6) como

$$\begin{aligned} \psi_k^A(\mathbf{r}) &= \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^A} \langle \mathbf{r} | \phi_j^A \rangle = \langle \mathbf{r} | \left(\sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^A} |\phi_j^A\rangle \right) = \langle \mathbf{r} | \psi_k^A \rangle \\ \psi_k^B(\mathbf{r}) &= \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^B} \langle \mathbf{r} | \phi_j^B \rangle = \langle \mathbf{r} | \left(\sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^B} |\phi_j^B\rangle \right) = \langle \mathbf{r} | \psi_k^B \rangle \end{aligned}$$

de donde los estados cuánticos $|\psi_k^A\rangle$ y $|\psi_k^B\rangle$ asociados a las redes triangulares A y B tienen la forma

$$|\psi_k^A\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^A} |\phi_j^A\rangle, \quad (2.7)$$

$$|\psi_k^B\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^B} |\phi_j^B\rangle. \quad (2.8)$$

Considerando (2.7) y (2.8) escribimos el estado cuántico $|\psi_k\rangle$ del grafeno como una combinación lineal de los estados $|\psi_k^A\rangle$ y $|\psi_k^B\rangle$,

$$|\psi_k\rangle = c_k^A |\psi_k^A\rangle + c_k^B |\psi_k^B\rangle. \quad (2.9)$$

Para calcular la estructura de bandas hacemos que el estado $|\psi_k\rangle$ satisfaga la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$H|\psi_k\rangle = \varepsilon_k|\psi_k\rangle \quad (2.10)$$

con el fin de resolver (2.10) expresamos en forma matricial el hamiltoniano H en la base $\{|\psi_k^A\rangle, |\psi_k^B\rangle\}$

$$H = \begin{pmatrix} \langle\psi_k^A|H|\psi_k^A\rangle & \langle\psi_k^A|H|\psi_k^B\rangle \\ \langle\psi_k^B|H|\psi_k^A\rangle & \langle\psi_k^B|H|\psi_k^B\rangle \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

los elementos de matriz de H dada por la ecuación (2.11) se deducen detalladamente en el apéndice A.1 y resultan

$$\langle\psi_k^A|H|\psi_k^A\rangle = \langle\psi_k^B|H|\psi_k^B\rangle = 0. \quad (2.12)$$

y

$$\langle\psi_k^A|H|\psi_k^B\rangle = -tf(\mathbf{k}) \quad (2.13)$$

donde $f(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_3}$.

Así mismo se encuentra

$$\langle\psi_k^B|H|\psi_k^A\rangle = -t\left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_3}\right) = -tf^*(\mathbf{k}) \quad (2.14)$$

Sustituyendo los resultados (2.12), (2.13) y (2.14) en la ecuación (2.11), la expresión matricial de H es

$$H = -t \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Los eigenvalores de energía de H dado por (2.15) se determinan de

$$\det(EI - H) = 0$$

$$\begin{vmatrix} E & tf(\mathbf{k}) \\ tf^*(\mathbf{k}) & E \end{vmatrix} = 0$$

$$E^2 - t^2|f(\mathbf{k})|^2 = 0$$

$$E_k = \pm t|f(\mathbf{k})| \quad (2.16)$$

siendo $|f(\mathbf{k})| = \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2} = \sqrt{f^*(\mathbf{k})f(\mathbf{k})}$, obtenida en el apéndice A.2 y expresado como

$$|f(\mathbf{k})| = \sqrt{1 + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right)} \quad (2.17)$$

es decir la estructura de bandas del grafeno (2.16) es

$$E_k = \pm t|f(\mathbf{k})| = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right)} \quad (2.18)$$

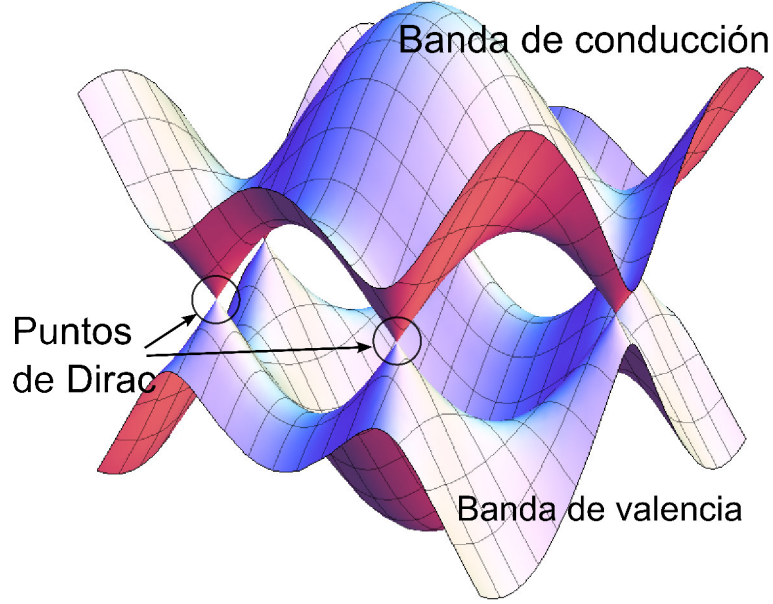


Figura 4: Bandas de valencia y conducción del grafeno dada por la Ec. (2.18)

La banda de energía $E_k = -t|f(\mathbf{k})|$ representa la banda de valencia y $E_k = t|f(\mathbf{k})|$ representa la banda de conducción. Cuando $|f(\mathbf{k})| = 0$ la banda de valencia y conducción coinciden, dichos puntos en el espacio recíproco se conocen como los puntos de Dirac \mathbf{K} y \mathbf{K}' .

2.3. Aproximación en puntos de Dirac

En esta sección verificamos que las bandas de valencia y conducción varían linealmente con el vector de onda en las proximidades de los puntos de Dirac \mathbf{K} y \mathbf{K}' , puntos que son dados de acuerdo a (2.18) como:

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x}, \quad \mathbf{K}' = -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x} \quad (2.19)$$

expresando el vector de onda \mathbf{k} como $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$, donde $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ es el vector de onda respecto a los puntos de Dirac podemos escribir $f(\mathbf{k})$ como

$$f(\mathbf{k}) = f(\mathbf{K} + \mathbf{q}) = \sum_i e^{i(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \cdot \vec{\delta}_i} = \sum_i e^{i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_i} e^{i\mathbf{q} \cdot \vec{\delta}_i} \quad (2.20)$$

utilizando la aproximación lineal $e^x \approx 1 + x$

$$e^{i\mathbf{q} \cdot \vec{\delta}_i} \approx 1 + i\mathbf{q} \cdot \vec{\delta}_i \quad (2.21)$$

$$f(\mathbf{k}) = \sum_i e^{i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_i} \left(1 - i\mathbf{q} \cdot \vec{\delta}_i \right) = f(\mathbf{K}) + \sum_i e^{-i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_i} i\mathbf{q} \cdot \vec{\delta}_i$$

si tenemos en cuenta que $f(\mathbf{K}) = 0$ entonces

$$f(\mathbf{k}) = f(\mathbf{K}) + \sum_i e^{i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_i} i\mathbf{q} \cdot \vec{\delta}_i = i \sum_i e^{i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_i} \mathbf{q} \cdot \vec{\delta}_i$$

$$i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_1 = i \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} \cdot \frac{a}{2} \left(-\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y} \right) = -i \frac{2\pi}{3}$$

$$i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_2 = i \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} \cdot \frac{a}{2} \left(\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y} \right) = i \frac{2\pi}{3}$$

$$i\mathbf{K} \cdot \vec{\delta}_3 = i \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} \cdot (a\hat{y}) = 0$$

$$f(\mathbf{k}) = i \left[e^{-i\frac{2\pi}{3}} \frac{a}{2} \left(-\sqrt{3}q_x - q_y \right) + e^{i\frac{2\pi}{3}} \frac{a}{2} \left(\sqrt{3}q_x - q_y \right) + aq_y \right]$$

donde $e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} = \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \pm i \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \frac{1}{2}(-1 \pm i\sqrt{3})$

$$f(\mathbf{k}) = i \frac{a}{2} \left[\frac{1}{2} \left(-1 - i\sqrt{3} \right) \left(-\sqrt{3}q_x - q_y \right) + \frac{1}{2} \left(-1 + i\sqrt{3} \right) \left(\sqrt{3}q_x - q_y \right) + 2q_y \right]$$

$$f(\mathbf{k}) = i \frac{a}{4} \left[\sqrt{3}q_x + q_y + i3q_x + i\sqrt{3}q_y - \sqrt{3}q_x + q_y + i3q_x - i\sqrt{3}q_y + 4q_y \right]$$

$$f(\mathbf{k}) = i \frac{a}{4} [6iq_x + 6q_y] = \frac{a}{4} [-6q_x + i6q_y]$$

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{3}{2}a(q_x - iq_y) \quad (2.22)$$

con este resultado el elemento de matriz $\langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle$ se expresa como

$$\langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle = -tf(\mathbf{k}) = t \left(\frac{3}{2}a(q_x - iq_y) \right) = \frac{3}{2}at(q_x - iq_y) \quad (2.23)$$

del mismo modo el elemento de matriz $\langle \psi_k^B | H | \psi_k^A \rangle$ es

$$\langle \psi_k^B | H | \psi_k^A \rangle = \langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle^* = \frac{3}{2}at(q_x + iq_y) \quad (2.24)$$

luego el hamiltoniano (2.11) en las proximidades del punto de Dirac \mathbf{K} es

$$H = \frac{3}{2}at \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

donde $v_F = \frac{3ta}{2\hbar} = \frac{3(2.8\text{eV})(1.42 \times 10^{-10}\text{m})}{6.58 \times 10^{-16}\text{eV}\cdot\text{s}} \approx 10^6 \text{ m/s}$ es la velocidad de Fermi.

Resolviendo el problema de eigenvalores para el hamiltoniano (2.25) encontramos

$$\det(E - H) = \begin{vmatrix} E & -\hbar v_F(q_x - iq_y) \\ -\hbar v_F(q_x + iq_y) & E \end{vmatrix} = 0$$

$$E^2 - \hbar^2 v_F^2 (q_x + iq_y)(q_x - iq_y) = 0$$

$$E^2 - \hbar^2 v_F^2 (q_x^2 + q_y^2) = 0$$

$$E_{\pm} = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| \quad (2.26)$$

La Ec. (2.26) prueba que efectivamente en las proximidades del punto de Dirac \mathbf{K} las bandas de energía E varían linealmente con el vector de onda $|\mathbf{q}|$. Un procedimiento similar al rededor del punto \mathbf{K}' prueba también que las bandas de energía en las proximidades de \mathbf{K}' varían linealmente con el vector de onda.

Los eigen estados correspondientes a la banda de energía $E_+ = \hbar v_F |\mathbf{q}|$ dado por (2.26), se expresan como $|\psi_k^+\rangle = c_A |\psi_k^A\rangle + c_B |\psi_k^B\rangle$ donde los coeficientes c_A y c_B se obtienen de

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = \hbar v_F |\mathbf{q}| \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}$$

$$(q_x - iq_y)c_B = |\mathbf{q}|c_A \quad (q_x + iq_y)c_A = |\mathbf{q}|c_B$$

$$\left(\frac{q_x}{|\mathbf{q}|} - i\frac{q_y}{|\mathbf{q}|}\right)c_B = c_A \quad \left(\frac{q_x}{|\mathbf{q}|} + i\frac{q_y}{|\mathbf{q}|}\right)c_A = c_B$$

$$(\cos\theta - i\sin\theta)c_B = c_A \quad (\cos\theta + i\sin\theta)c_A = c_B$$

$$c_B = e^{i\theta}c_A$$

asumiendo la condición de normalización $|c_A|^2 + |c_B|^2 = 1$ y $c_A = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\theta/2}$ el eigen estado correspondiente a E_+ se escriben como

$$|\psi_k^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i\theta/2}|\psi_k^A\rangle + e^{i\theta/2}|\psi_k^B\rangle] \quad (2.27)$$

donde $\tan \theta = \frac{q_y}{q_x}$.

De manera similar se encuentra que el eigen estado $|\psi_k^-\rangle$ asociado a la banda de energía $E_- = -\hbar v_F |\mathbf{q}|$ se expresa como

$$|\psi_k^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i\theta/2} |\psi_k^A\rangle - e^{i\theta/2} |\psi_k^B\rangle]. \quad (2.28)$$

En el punto de Dirac \mathbf{K}' se encuentra que $f(\mathbf{q}')$ es

$$f(\mathbf{q}') = -\frac{3}{2}a(-q'_x - iq'_y) = \frac{3}{2}a(q'_x + iq'_y) \quad (2.29)$$

con lo cual las bandas de energía resultan

$$E'_\pm = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}'| \quad (2.30)$$

siendo los eigen estados $|\psi_{k'}^\pm\rangle$ asociados a las bandas E'_\pm dados por

$$|\psi_{k'}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\theta/2} |\psi_{k'}^A\rangle \pm e^{-i\theta/2} |\psi_{k'}^B\rangle]. \quad (2.31)$$

Considerando las matrices de Pauli $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ reescribimos la Ec.(2.25) al rededor de \mathbf{K} como

$$H_K(\mathbf{q}) = \hbar v_F (\sigma_x q_x + \sigma_y q_y) = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}. \quad (2.32)$$

De manera equivalente en la vecindad del punto de Dirac \mathbf{K}' se encuentra $H_{K'}(\mathbf{q}) = -H_K^\dagger(\mathbf{q})$, de modo que el hamiltoniano total en los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' es

$$H = v_F \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

2.4. Grafeno en un campo magnético uniforme

La dinámica de los electrones dentro de un material semiconductor convencional se describe usualmente utilizando la mecánica cuántica no relativista, dentro del cual se encuentra que la estructura de bandas de energía tiene una relación de dispersión parabólica con el vector de onda, de la forma $E = E_\pm \pm \hbar^2 k^2 / 2m^*$, siendo m^* la masa efectiva, E_+ la energía mínima en la banda de conducción y E_- la energía máxima en

la banda de valencia. Bajo la presencia de un campo magnético uniforme de magnitud B la energía para el movimiento perpendicular al campo es cuantizado en un conjunto de niveles de Landau $E_n = E_\pm \pm \hbar\omega_c(n + 1/2)$, con $n = 0, 1, 2, \dots$ y $\omega_c = eB/m^*$ la frecuencia ciclotrónica [25]. Este modelo falla cuando es aplicado a los electrones del grafeno, por tanto es necesario utilizar las ecuaciones relativistas de Dirac, considerando que los electrones del grafeno son fermiones de Dirac, caso en el cual de acuerdo a (2.26) la estructura de bandas es proporcional al vector de onda, para analizar el comportamiento de los electrones del grafeno bajo la acción de un campo magnético \mathbf{B} uniforme, asumimos que $\mathbf{B} = B_0\hat{z}$, con B_0 constante y teniendo en cuenta que \hat{z} es un vector unitario perpendicular al plano del grafeno. Utilizando el potencial vector \mathbf{A} tenemos que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ donde $\mathbf{A} = -B_0y\hat{x}$ es el gauge de Landau. La sustitución de Pierls [26,27], $p_x \rightarrow p_{0x} = p_x - qA = p_x - eB_0y$, con $q = -e$ carga del electrón, permite escribir el hamiltoniano (2.33) como:

$$H = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_{0x} - ip_y & 0 & 0 \\ p_{0x} + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_{0x} + ip_y \\ 0 & 0 & -p_{0x} - ip_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

luego la ecuación de Dirac para H es

$$v_F \begin{pmatrix} 0 & p_{0x} - ip_y & 0 & 0 \\ p_{0x} + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_{0x} + ip_y \\ 0 & 0 & -p_{0x} - ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_K^A \\ \psi_K^B \\ \psi_{K'}^A \\ \psi_{K'}^B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_K^A \\ \psi_K^B \\ \psi_{K'}^A \\ \psi_{K'}^B \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

donde ψ_K^A y ψ_K^B son los espinores asociados a los átomos A y B en \mathbf{K} y $\psi_{K'}^A$ y $\psi_{K'}^B$ los espinores de los átomos A y B en \mathbf{K}' .

Las soluciones de ψ_K^A y ψ_K^B al rededor del punto \mathbf{K} se obtienen de las dos primeras ecuaciones de (2.35),

$$\begin{aligned} \varepsilon\psi_K^A &= v_F(p_{0x} - ip_y)\psi_K^B \\ \varepsilon\psi_K^B &= v_F(p_{0x} + ip_y)\psi_K^A \end{aligned}$$

desacoplando ψ_K^A y ψ_K^B de las ecuaciones anteriores, tenemos

$$\varepsilon^2\psi_K^A = v_F^2(p_{0x} - ip_y)(p_{0x} + ip_y)\psi_K^A \quad (2.36)$$

$$\varepsilon^2\psi_K^B = v_F^2(p_{0x} + ip_y)(p_{0x} - ip_y)\psi_K^B \quad (2.37)$$

con la finalidad de encontrar los niveles de energía ε para los estados ψ_K^B , consideramos que el hamiltoniano (2.34) es independiente de x , es decir $[H, p_x] = 0$, en consecuencia

p_x es una integral de movimiento, $[p_x, p_y] = 0$, $[y, p_y] = i\hbar$.

$$\begin{aligned}
\varepsilon^2 \psi_K^B &= v_F^2 (p_{0x}^2 - ip_{0x} p_y + ip_y p_{0x} + p_y^2) \psi_K^B \\
\varepsilon^2 \psi_K^B &= v_F^2 (p_{0x}^2 - i[p_{0x}, p_y] + p_y^2) \psi_K^B \\
\varepsilon^2 \psi_K^B &= v_F^2 ((p_x - eB_0 y)^2 - i[p_x - eB_0 y, p_y] + p_y^2) \psi_K^B \\
\varepsilon^2 \psi_K^B &= v_F^2 ((p_x - eB_0 y)^2 - \hbar e B_0 + p_y^2) \psi_K^B \\
\left(\frac{\varepsilon^2}{v_F^2} + \hbar e B_0 \right) \psi_K^B &= \left(e^2 B_0^2 \left(y - \frac{p_x}{eB_0} \right)^2 + p_y^2 \right) \psi_K^B \\
\frac{1}{2m} \left(\frac{\varepsilon^2}{v_F^2} + \hbar e B_0 \right) \psi_K^B &= \left(\frac{e^2 B_0^2}{2m} \left(y - \frac{p_x}{eB_0} \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} \right) \psi_K^B \\
\frac{1}{2m} \left(\frac{\varepsilon^2}{v_F^2} + \hbar e B_0 \right) \psi_K^B &= \left(\frac{k}{2} (y - y_0)^2 + \frac{p_y^2}{2m} \right) \psi_K^B
\end{aligned} \tag{2.38}$$

donde $k = \frac{e^2 B_0^2}{m}$, $y_0 = \frac{p_x}{eB_0}$.

El lado derecho de la ecuación anterior corresponde al hamiltoniano del oscilador armónico simple, oscilando al rededor de y_0 con eigenvalores $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$, con $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{e^2 B_0^2}{m^2}} = \frac{eB_0}{m}$, es decir

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m} \left(\frac{\varepsilon^2}{v_F^2} + \hbar e B_0 \right) &= \hbar \frac{eB_0}{m} \left(n + \frac{1}{2} \right) \\
\frac{\varepsilon^2}{v_F^2} + \hbar e B_0 &= \hbar e B_0 (2n) + \hbar e B_0 \\
\varepsilon^2 &= 2v_F^2 \hbar e B_0 n \\
\varepsilon &= \pm v_F \sqrt{2\hbar e B_0 n}
\end{aligned} \tag{2.39}$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots$ como ε tiene raíces positivos y negativos, podemos extender los valores de n a los enteros negativos y escribir los niveles de energía como

$$\varepsilon = \text{sgn}(n) \sqrt{\frac{2\hbar e B}{c}} v_F \sqrt{|n|} = \hbar\omega^{Dirac} \text{sgn}(n) \sqrt{|n|}, \tag{2.40}$$

con $\omega^{Dirac} = v_F \sqrt{\frac{2eB}{\hbar}}$.

Los niveles de Landau n pueden ser positivos o negativos, los valores positivos corresponden a electrones (banda de conducción) mientras los valores negativos corresponden a huecos (banda de valencia). Además dichos niveles no son equidistantes como en el caso convencional de materiales 2D, teniendo la máxima separación de energía $\Delta E_{max} = \hbar\omega^{Dirac}$ entre $n = 0$ y $n = 1$.

2.5. Mariposa de Hofstadter

En 1976, D. Hofstadter predijo un raro efecto cuántico, conocido como mariposa de Hofstadter. El fenómeno consiste en que los electrones de una red bidimensional sometido a fuertes campos magnéticos muestran un espectro de energía complejo con características fractales [28, 29].

2.5.1. Red cuadrada finita en campo magnético uniforme

Consideramos primero el caso de una red cuadrada bidimensional finita de 3×3 átomos, bajo la acción de un campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$, que es representado por el gauge de Landau $\mathbf{A} = -B_0 y \hat{x}$, de modo que la sustitución de Pierls [14] permite establecer que el parámetro de Hopping entre vecinos proximos sobre el eje x es dado por $t_x \rightarrow te^{2i\pi m\alpha}$, con m un número entero, y el parámetro de Hopping entre vecinos proximos en el eje y es $t_y \rightarrow t$. En la figura 5 se observa la red finita de 3×3 átomos, en la que el origen de coordenadas (x, y) se encuentra en la posición del átomo 1, de modo que el número de flechas paralelas al eje horizontal representan los valores enteros de m , que para el caso son $m = 0, 1, 2$.

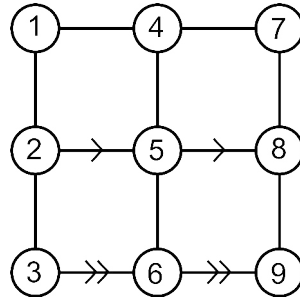


Figura 5: Red cuadrada finita 3×3 bajo la acción de un magnético uniforme.

Teniendo en cuenta la sustitución de Pierls [30–32] y el modelo del *tight-binding* el

hamiltoniano correspondiente a red finita de la figura 5 es

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & t & 0 & te^{2i\pi\alpha} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & 0 & 0 & te^{4i\pi\alpha} & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & te^{-2i\pi\alpha} & 0 & t & 0 & t & 0 & te^{2i\pi\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & te^{-4i\pi\alpha} & 0 & t & 0 & 0 & 0 & te^{4i\pi\alpha} \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & te^{-2i\pi\alpha} & 0 & t & 0 & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & te^{-4i\pi\alpha} & 0 & t & 0 \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

El espectro de energía de (2.41) que constituye la mariposa de Hofstadter correspondiente se muestra en la figura 6, donde $\alpha = \Phi/\Phi_e = p/q$ la razón del flujo magnético al flujo cuántico, es decir Φ es el flujo magnético por celda unitaria y $\Phi_e = h/e$ es el flujo cuántico, la razón p/q indica que α tiene valores racionales [29]. Siguiendo la misma idea utilizada para una red finita de la figura 5 calculamos el espectro de energías para redes finitas de 15×15 átomos y 25×25 átomos, cuyos resultados gráficos se presentan en las figuras 7 y 8 respectivamente.

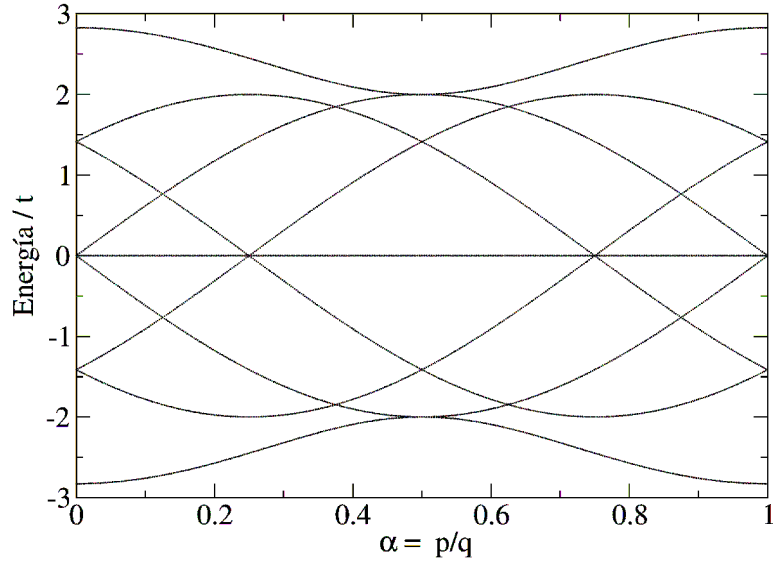


Figura 6: Espectro de energía de una red cuadrada finita de 3×3 átomos en función de α .

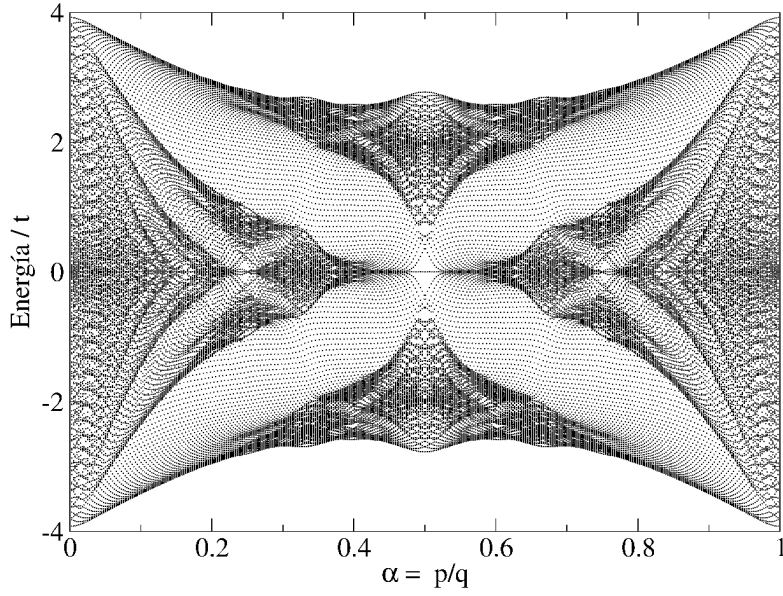


Figura 7: Espectro de energía para una red cuadrada finita de 15×15 átomos en función de α .

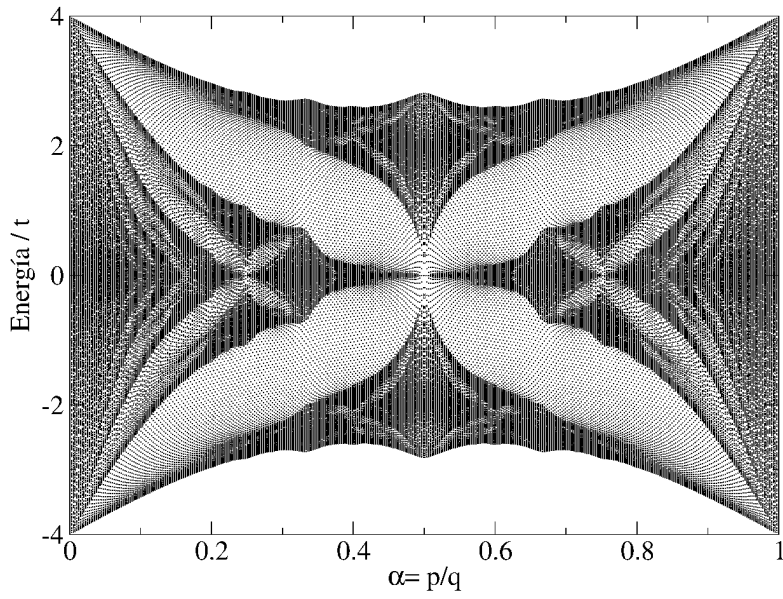


Figura 8: Espectro de energía para una red cuadrada finita de 25×25 átomos en función de α .

2.5.2. Red ladrillo finito en campo magnético uniforme

Con la finalidad de construir las mariposas de Hofstadter para redes finitas de grafeno, utilizamos la equivalencia topológica con la red de ladrillo, consideramos primero el caso de una red ladrillo de 3×3 átomos mostrados en la parte derecha de a figura 9, teniendo en cuenta que el campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$ es representado por el gauge de Landau $\mathbf{A} = -B_0 y \hat{x}$ y que el principio de sustitución de Pierls [30–32] hace que el parámetro de Hopping entre vecinos proximos es $t_x \rightarrow te^{2i\pi m\alpha}$ y $t_y \rightarrow t$.

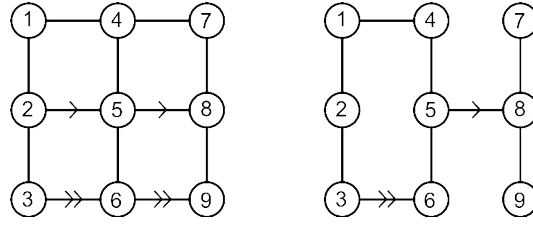


Figura 9: (izquierda) Red cuadrada de 3×3 átomos (derecha) Red de ladrillo de 3×3 átomos

El hamiltoniano *tight-binding* correspondiente a la red de ladrillo con 3×3 átomos representado en la figura 9 es

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & te^{0i\pi\alpha} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & 0 & 0 & te^{4i\pi\alpha} & 0 & 0 & 0 \\ te^{-0i\pi\alpha} & 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & t & 0 & te^{2i\pi\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & te^{-4i\pi\alpha} & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & te^{-2i\pi\alpha} & 0 & t & 0 & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

Es espectro de energía asociado al hamiltoniano (2.42), que constituye la mariposa de Hofstadter se muestra en la figura 10. Del mismo modo las mariposas de Hofstadter asociados a redes finitas de grafeno constituidos por 15×15 átomos y 25×25 átomos se presentan en las figuras 11 y 12 respectivamente.

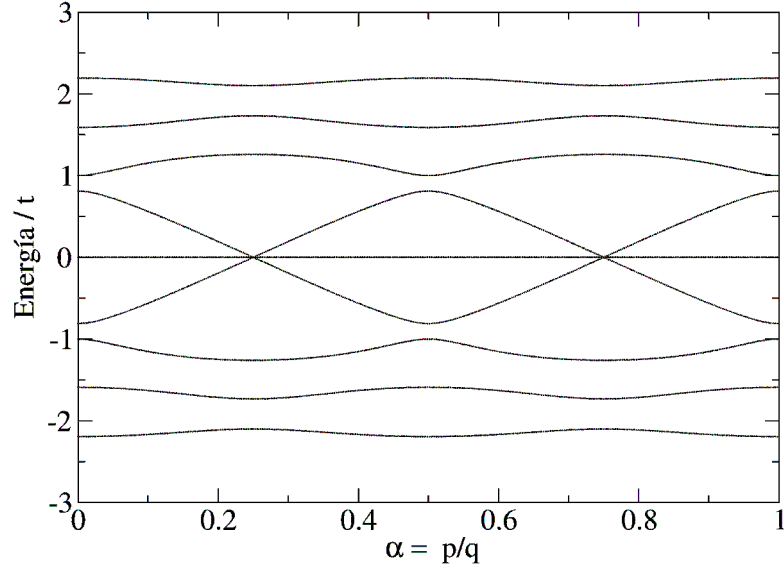


Figura 10: Espectro de energía de la red ladrillo de 3×3 átomos dado por el hamiltoniano (2.42) en función de α .

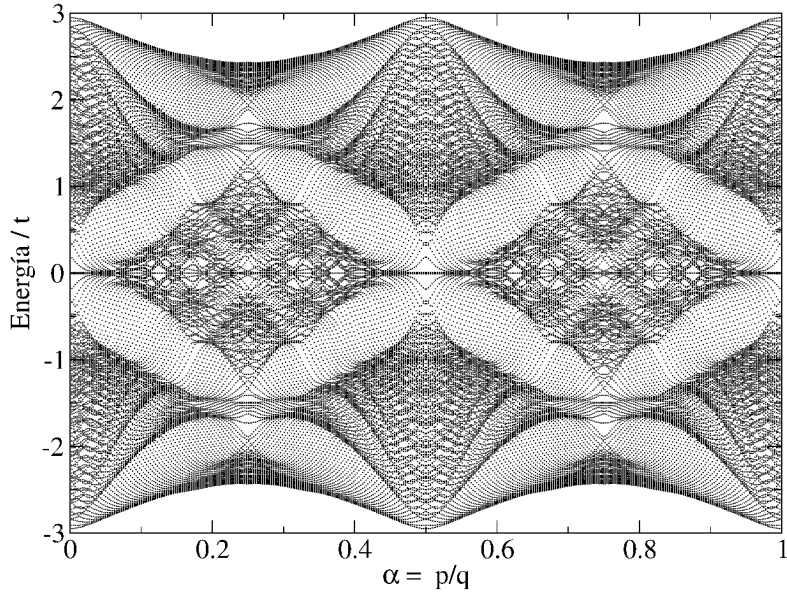


Figura 11: Espectro de energía de la red ladrillo de 15×15 átomos en función de α .

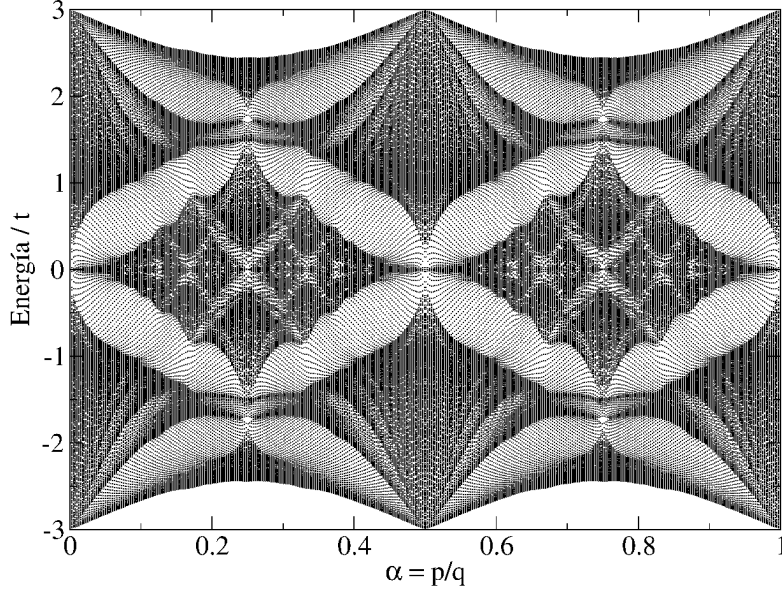


Figura 12: Espectro de energía de la red ladrillo de 25×25 átomos en función de α .

2.6. Mariposa de Hofstadter para redes infinitas

En esta sección reconstruimos el espectro de energía de redes infinitas bajo la acción de un campo magnético uniforme, que para el caso de redes cuadradas bidimensionales fue obtenido primero por Hofstadter [28], y verificado en varias publicaciones [33–36], para el caso del grafeno [34, 37]

2.6.1. Red cuadrada

Sea el campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$, representado por potencial vectorial $\mathbf{A} = -B_0 y \hat{x}$ de modo que la sustitución de Pierls introduce el factor de fase en el hopping entre vecinos próximos en el eje x dado por $t_x \rightarrow te^{-2\pi i m \alpha}$ y el hopping entre vecinos proximos en el eje y es $t_y \rightarrow t$. La ecuación de Schödinger aplicada sobre el sitio (n, m) de la figura 13 produce

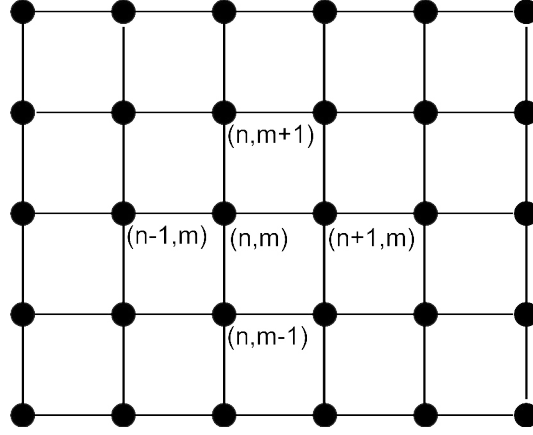


Figura 13: Parte de una red cuadrada infinita en el que se denotan la posición del átomo (n, m) y sus vecinos proximos

$$\varepsilon\psi_{n,m} = te^{-2i\pi m\alpha}\psi_{n+1,m} + te^{2i\pi m\alpha}\psi_{n-1,m} + t\psi_{n,m-1} + t\psi_{n,m+1} \quad (2.43)$$

con $\psi_{n,m}$ función de onda de los electrones del átomo en el sitio (n, m) y $\alpha = \Phi/\Phi_0$.

con el fin de transformar (2.43) a un problema unidimensional consideramos $k_x = k_y = 0$ y

$$\begin{aligned} \psi_{n,m} &= e^{ik_x na} e^{ik_y ma} \psi_m = \psi_m \\ \varepsilon\psi_m &= te^{-2i\pi m\alpha}\psi_m + te^{2i\pi m\alpha}\psi_m + t\psi_{m-1} + t\psi_{m+1} \end{aligned}$$

$$\varepsilon\psi_m = 2t \cos(2\pi m\alpha)\psi_m + t\psi_{m-1} + t\psi_{m+1} \quad (2.44)$$

cuando α es un número racional p/q , p y q son primos entre sí, el tamaño de la celda unidad magnética es (qa, a) , llamemos $\psi(x+qa, y) = \psi(x, y)$ y $\psi(x, y+a) = \psi(x, y)$ [38].

$$\begin{pmatrix} 2t \cos(2\pi\alpha) & t & 0 & \dots & 0 & \dots & t \\ t & 2t \cos(4\pi\alpha) & t & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & t & 2t \cos(6\pi\alpha) & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & t & 2t \cos(2\pi(q-1)\alpha) & t \\ t & 0 & 0 & \ddots & 0 & t & 2t \cos(2\pi q\alpha) \end{pmatrix}$$

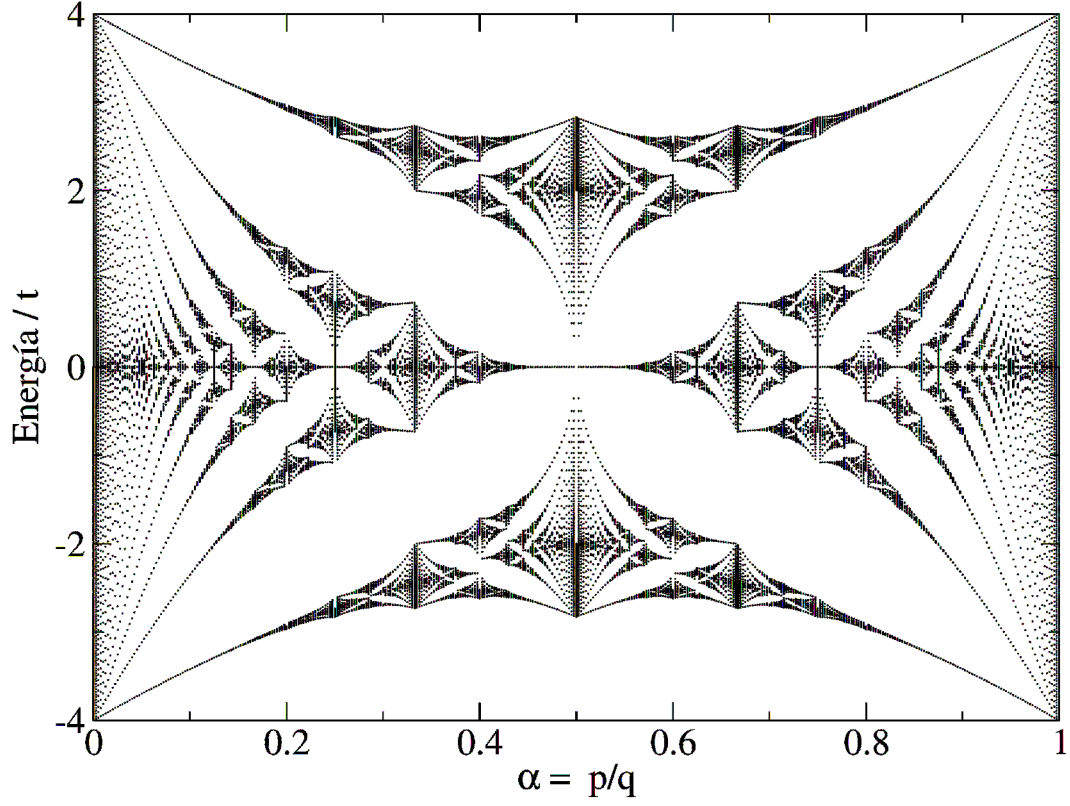


Figura 14: Mariposa de Hofstadter red cuadrada infinita

2.6.2. Grafeno

El espectro de energía del grafeno reproducido en esta sección, fué calculado primero por Rammal [37], el mismo que tiene la misma estructura recursiva que la mariposa de Hofstadter [28]. En nuestra deducción consideramos que el campo magnético uniforme es $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$, que se representa por potencial vectorial $\mathbf{A} = -B_0 y \hat{x}$ de modo que la sustitución de Pierls introduce un factor de fase en el parámetro de hopping t_x entre vecinos próximos en el eje x dado por $t_x \rightarrow t e^{-i2\pi m \alpha}$ y mantiene invariable el parámetro de hopping entre vecinos próximos en el eje y , es decir $t_y \rightarrow t$.

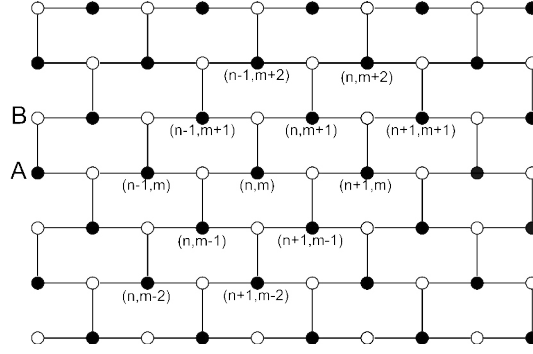


Figura 15: Parte de una red ladrillo infinita en el que indica la posición del sitio (n, m) y sus vecinos próximos

Aplicando la ecuación de Schrödinger sobre los electrones de los átomos de las sub redes A y B situados en la posición (n, m) de la figura 15 tenemos

$$\varepsilon\psi_{n,m} = t\psi'_{n,m} + te^{-i2\pi m\alpha}\psi'_{n+1,m-1} + te^{i2\pi m\alpha}\psi'_{n,m-1} \quad (2.45)$$

$$\varepsilon\psi'_{n,m} = t\psi_{n,m} + te^{-i2\pi(m+1)\alpha}\psi_{n,m+1} + te^{i2\pi(m+1)\alpha}\psi_{n-1,m+1} \quad (2.46)$$

con $\psi_{n,m}$ y $\psi'_{n,m}$ funciones de onda de los electrones en las sub redes A y B ubicados en los sitios (n, m) respectivamente y $\alpha = \phi/\phi_0$.

Para transformar (2.45) y (2.46) a un problema unidimensional consideramos $k_x = k_y = 0$ y

$$\psi_{n,m} = e^{ik_x na} e^{ik_y ma} \psi_m = \psi_m, \quad \psi'_{n,m} = e^{ik_x na} e^{ik_y ma} \psi'_m = \psi'_m$$

$$\begin{aligned} \varepsilon\psi_m &= t\psi'_m + te^{-i2\pi m\alpha}\psi'_{m-1} + te^{i2\pi m\alpha}\psi'_{m-1} \\ \varepsilon\psi'_m &= t\psi_m + te^{-i2\pi(m+1)\alpha}\psi_{m+1} + te^{i2\pi(m+1)\alpha}\psi_{m+1} \end{aligned}$$

$$\varepsilon\psi_m = t\psi'_m + 2t \cos(2\pi m\alpha)\psi'_{m-1} \quad (2.47)$$

$$\varepsilon\psi'_m = t\psi_m + 2t \cos(2\pi(m+1)\alpha)\psi_{m+1} \quad (2.48)$$

De acuerdo a las ecuaciones (2.47) y (2.48) $\alpha = p/q$ es un número racional, que permite calcular el espectro de energía del grafeno usando una red periódica de periodo

$2q$, siendo por tanto el problema de eigenvalores (2.47) y (2.48) expresado por una matriz de dimensión $2q \times 2q$ dada en (2.49) con condiciones de frontera periódicas $\psi_{2q+1} = e^{ik_y 2q} \psi_1$.

$$\begin{pmatrix} 0 & t & 0 & \dots & 0 & \dots & 2t \cos(0\pi\alpha) \\ t & 0 & 2t \cos(2\pi\alpha) & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2t \cos(2\pi\alpha) & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 2t \cos(2q\pi\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2t \cos(2q\pi\alpha) & 0 & t \\ 2t \cos(0\pi\alpha) & 0 & 0 & \dots & 0 & t & 0 \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

En el límite de campos magnéticos débiles, la figura 16 muestra claramente los niveles de Landau. Cuando el campo magnético es alto estos niveles de Landau presentan sub bandas [39].

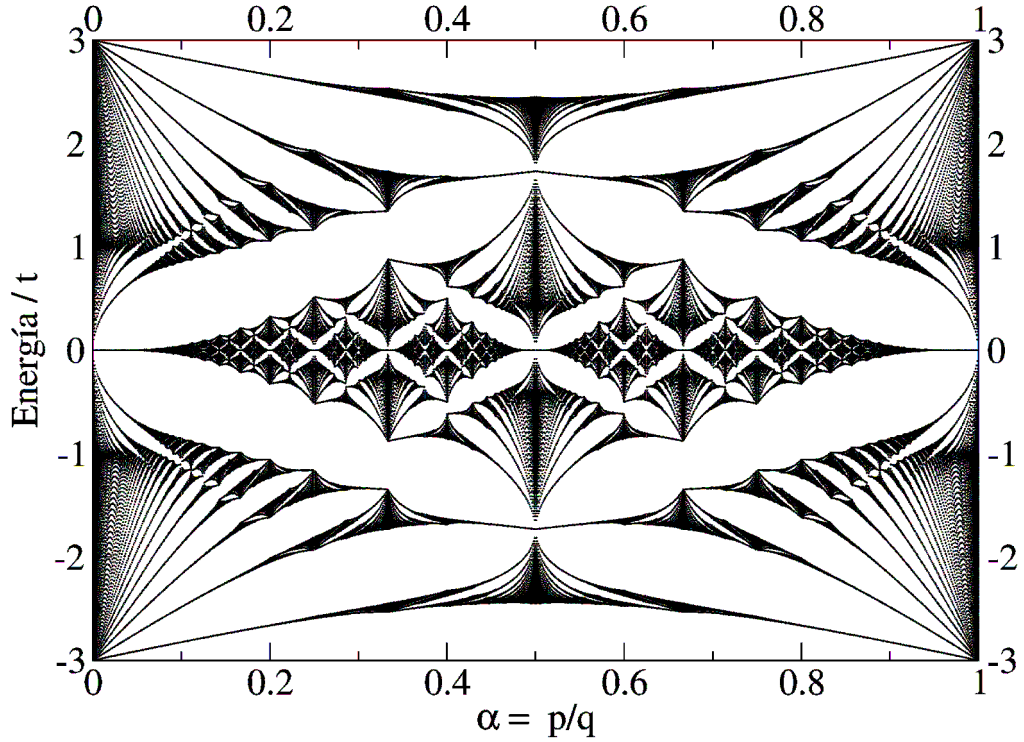


Figura 16: Mariposa de Hofstadter para el grafeno

Capítulo 3

Transporte electrónico

Nuestro propósito en el presente capítulo es describir las herramientas necesarias para describir el transporte electrónico en sistemas de baja dimensionalidad, conocidos como sistemas mesoscópicos, dichos sistemas son el puente entre los sistemas macroscópicos y la escala atómica. La escala mesoscópica tiene longitudes típicas que van desde decenas de nm hasta algunos μm , y es aquella en la que los electrones de un semiconductor o un metal ponen de manifiesto su comportamiento cuántico. En estos sistemas mesoscópicos el transporte electrónico se encuentra influenciada por el tamaño del sistema L , la longitud de onda de Fermi λ_F , el camino libre medio elástico l_e y la longitud de coherencia de fase L_ϕ .

La longitud de onda de Fermi λ_F se encuentra relacionada con la energía cinética del electrón y por tanto depende de la temperatura del sistema. Cuando el sistema tiene dimensiones comparables a λ_F la descripción clásica fracasa, siendo por tanto el comportamiento cuántico de las partículas muy importante. En sistemas semiconductoras λ_F tiene ordenes de magnitud mayores que en un metal.

El camino libre medio elástico es la distancia promedio que recorre un electrón antes de ser dispersado elásticamente por un ión del sistema $l_e = v_F \tau_e$ (donde v_F es la velocidad de Fermi y τ_e el tiempo medio entre colisiones elásticas). En metales l_e es del orden de los 10nm. En cambio a temperaturas del orden de los mili-Kelvin en materiales semiconductores de alta pureza l_e puede llegar hasta los 100 μm .

La longitud de coherencia de fase (L_ϕ) es la distancia dentro de la cual la función de onda electrónica preserva su fase. Esta longitud es de vital importancia para definir el

transporte en sistemas mesoscópicos. Para un sistema de longitud finita L , el transporte es coherente siempre y cuando la longitud L sea menor que la longitud de coherencia de fase L_ϕ ($L < L_\phi$).

Dentro del transporte coherente pueden distinguirse a la vez tres regímenes de transporte:

Régimen Balístico: se da cuando el camino libre medio l_e entre colisiones elásticas es mayor que L , $\lambda_F \ll L \ll l_e$.

Régimen Difusivo: en este régimen, el camino libre medio l_e entre colisiones elásticas es menor que L , $\lambda_F \ll l_e \ll L$.

Régimen Localizado: se da cuando el camino libre medio l_e entre colisiones elásticas es mucho menor que L , $l_e \ll \lambda_F \ll L$.

Asímismo cuando $\lambda_F \ll l_e \ll L_\phi \ll L$ tenemos el transporte en régimen macroscópico.

3.1. Formalismo de Landauer

El formalismo de Landauer, se utiliza para describir el transporte eléctrico de nanoestructuras en el régimen balístico utilizando la conductancia eléctrica [23, 40, 41], expresado como:

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_F). \quad (3.1)$$

Siendo $T(E_F)$ los coeficientes de transmisión cuántica correspondiente a todos los canales cuánticos permitidos en el nivel de energía de Fermi E_F .

El sistema utilizado para el presente estudio se representa en la figura 17 y se encuentra constituido por tres partes, el contacto izquierdo (L), el punto cuántico (D) y el contacto derecho (R), los contactos conectan el punto cuántico a reservorios de electrones termalizados que ocupan los estados de los contactos. La conexión entre el contacto y los reservorios se consideran ideales (conductores perfectos), de modo que los electrones que vienen de los contactos y pasan a través del punto cuántico son dispersados solamente en la interfase entre los contactos y el punto cuántico.

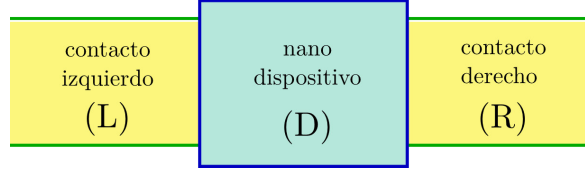


Figura 17: Modelo de nanodispositivo conectado a dos contactos semi-infinitos

La dimensión de los contactos es semi-infinita, de modo que dichos contactos son invariantes en la dirección de propagación y tienen infinitos estados permitidos. La dimensión del punto cuántico en la dirección transversal cuantiza los modos de propagación φ_n permitidos, modos que son conocidos también como canales permitidos.

Para la deducción de (3.1), se considera que la población de estados electrónicos en los contactos es dado por la distribución de Fermi-Dirac $f(E - \mu_\alpha)$, donde μ_α es el potencial químico del contacto α , representando $\alpha = L$ al contacto izquierdo y $\alpha = R$ al contacto derecho. La corriente eléctrica generada por los electrones del contacto α que pasan a través del punto cuántico utilizando el canal φ_n es dado por:

$$I_{\alpha n} = \frac{2e}{W} \sum_k T_n(E) v(k) f(E - \mu_\alpha), \quad \alpha = L, R. \quad (3.2)$$

donde W es la longitud del punto cuántico, el factor 2 es debido a la degeneración que presentan los niveles electrónicos por la presencia del espín electrónico, $v(k)$ es la velocidad de grupo de los electrones y $T_n(E)$ la probabilidad de transmisión de electrones por el canal φ_n a la energía $E(k)$.

La corriente neta que pasa por cada canal φ_n a través del punto cuántico se obtiene calculando la diferencia entre la corriente I_{Ln} producido por los electrones del contacto izquierdo y la corriente I_{Rn} producidos por los electrones del contacto derecho

$$I_n = |I_{Ln} - I_{Rn}| = \frac{2e}{W} \sum_k v(k) T_n(E) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]. \quad (3.3)$$

de modo que la corriente total a través del punto cuántico es la suma las corrientes I_n sobre todos los canales permitidos:

$$I = \sum_n I_n = \frac{2e}{W} \sum_{n,k} v(k) T_n(E) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]. \quad (3.4)$$

en la ecuación ultima la sumatoria discreta se transforma al dominio continuo de k , considerando la regla usual

$$\sum_k \rightarrow \frac{W}{2\pi} \int dk, \quad (3.5)$$

que permite reescribir (3.4) como

$$I = \frac{e}{\pi} \sum_n \int dk v(k) T_n(E) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]. \quad (3.6)$$

y considerando que

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk},$$

encontramos

$$I = \frac{2e}{h} \sum_n \int dE T_n(E) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]. \quad (3.7)$$

a bajas temperaturas y pequeños voltajes aplicados $eV = \mu_L - \mu_R$, podemos hacer una expansión en serie de Taylor de $f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)$ al rededor de la energía de Fermi E_F , que conduce a $f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R) \approx \delta(E - E_F)(\mu_L - \mu_R)$, resultado que permite expresar la Ec. (3.7) como

$$I = \frac{2e}{h} \sum_n \int dE T_n(E) \delta(E - E_F) (\mu_L - \mu_R). \quad (3.8)$$

$$I = \frac{2e}{h} (\mu_L - \mu_R) \sum_n T_n(E_F)$$

$$I = \frac{2e^2}{h} V \sum_n T_n(E_F)$$

considerando que la conductancia eléctrica G se define como $G = I/V$ tenemos

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(E_F), \quad (3.9)$$

de modo que la fórmula de Landauer queda como:

$$G(E_F) = \frac{2e^2}{h} T(E_F) \quad (3.10)$$

siendo $T(E_F) = \sum T_n(E_F)$ el coeficiente de transmisión cuántica total sobre todos los canales permitidos.

3.2. Formalismo de la función de Green

Las funciones de Green son una herramienta poderosa para resolver muchos problemas de la física, en la presente sección describimos el método de la función de Green para calcular los coeficientes de transmisión, útiles para calcular las propiedades de transporte de sistemas nanoscópicos como el grafeno.

3.2.1. Función de Green

En mecánica cuántica para describir una partícula sujeta a un potencial independiente del tiempo se resuelve la ecuación de Schödinger

$$H|\psi_n\rangle = E|\psi_n\rangle, \quad (3.11)$$

donde H es el operador hamiltoniano asociado a la partícula. Para resolver la ecuación (3.11) en representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ definimos la función de Green correspondiente como solución de la ecuación

$$[E - H]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.12)$$

Si utilizamos el operador $G(E)$ para representar la función de Green, entonces la Ec. (3.12) se reescribe como,

$$[E - H]G(E) = 1, \quad (3.13)$$

de modo que

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \langle \mathbf{r} | G(E) | \mathbf{r}' \rangle. \quad (3.14)$$

Si E no es un eigenvalor de H , entonces la solución formal de la ecuación (3.13) para $G(E)$ es dado por

$$G(E) = \frac{1}{E - H} = [E - H]^{-1} \quad (3.15)$$

luego si E_n son los eigenvalores de H asociados a los autoestados normalizados $|\psi_n\rangle$ entonces (3.15) se expresa como

$$G(E) = \frac{1}{E - H} \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \sum_n \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E - E_n} \quad (3.16)$$

donde los E_n son reales debido a que H es hermitiano. Por tanto $G(E)$ es analítica en el plano complejo, con excepción a aquellos puntos en las cuales E toma valores reales $E = E_n$, puntos en las cuales $G(E)$ presenta una discontinuidad (es decir el límite de $G(E)$ cuando E se aproxima a E_n tiende al infinito).

Sin embargo si no se especifica las condiciones de frontera, la inversa del operador $E - H$ en la Ec. (3.15) no está definido, en dichos casos, con la finalidad de levantar la discontinuidad de $G(E)$ asumimos que $E \approx E \pm i\eta$ con $\eta \rightarrow 0$, de modo que definimos las funciones de Green retardadas $G^+(E)$ y las funciones de Green avanzadas $G^-(E)$ como:

$$G^\pm(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(E \pm i\eta) \quad (3.17)$$

La Ec. (3.13) permite expresar $G^\pm(E)$ como

$$G^\pm(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} [E \pm i\eta - H]^{-1} \quad (3.18)$$

en adelante nos referimos como funciones de Green G a las funciones de Green retardadas G^+ , de modo que $G^- = (G^+)^\dagger = G^\dagger$.

3.2.2. Funciones de Green fuera de equilibrio

Las funciones de Green fuera de equilibrio NEGF son regularmente utilizados para calcular intensidad de corriente y densidad de carga en dispositivos a escala nanometrica bajo un cierto voltage aplicado. Este metodo es usado principalmente para el transporte balistico, pero puede ser extendido para incluir dispersion inelastica [42]. En esta sección derivamos la ecuación de NEGF para la corriente eléctrica y su relación con el coeficiente de transmisión.

Siendo nuestro propósito determinar la función de Green G_D del nano-dispositivo de la figura 17 reescribimos la ecuación de Schrödinger (3.11) para el sistema completo como

$$\begin{pmatrix} H_L & H_{LD} & 0 \\ H_{DL} & H_D & H_{DR} \\ 0 & H_{RD} & H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_L\rangle \\ |\psi_D\rangle \\ |\psi_R\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\psi_L\rangle \\ |\psi_D\rangle \\ |\psi_R\rangle \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

donde H_D es el hamiltoniano del nanodispositivo, H_L y H_R los hamiltonianos de los contactos izquierdo y derecho, $H_{\alpha D}$ con $\alpha = L, R$ son las matrices de acoplamiento entre el contacto $\alpha = L, R$ y el nano-dispositivo, $|\psi_D\rangle$, $|\psi_L\rangle$ y $|\psi_R\rangle$ los estados cuánticos asociados a H_D , H_L y H_R respectivamente.

¿Por qué calculamos las funciones de Green?

Para un sistema representado por el hamiltoniano H , las funciones de Green proporcionan la respuesta del sistema a una perturbación constante $|v\rangle$, en la ecuación de Schrödinger:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle + |v\rangle \quad (3.20)$$

$$(E - H)|\psi\rangle = -|v\rangle \quad (3.21)$$

de modo que la respuesta a la perturbación es

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= -[E - H]^{-1}|v\rangle \\ |\psi\rangle &= -G(E)|v\rangle \end{aligned} \quad (3.22)$$

La función de Green nos permite determinar muchas propiedades de un sistema físico, tales como la función espectral, la densidad de estados (DOS), la función de transmisión, etc. Por ejemplo calculamos los estados $|\psi_L\rangle$ asociado al contacto izquierdo y $|\psi_R\rangle$ asociado al contacto derecho en función de los estados del punto cuántico $|\psi_D\rangle$ a partir de la ecuación de Schrödinger (3.19), que se reescribe como:

$$H_L|\psi_L\rangle + H_{LD}|\psi_D\rangle = E|\psi_L\rangle \quad (3.23)$$

$$H_{DL}|\psi_L\rangle + H_D|\psi_D\rangle + H_{DR}|\psi_R\rangle = E|\psi_D\rangle \quad (3.24)$$

$$H_{RD}|\psi_D\rangle + H_R|\psi_R\rangle = E|\psi_R\rangle \quad (3.25)$$

obteniendo $|\psi_L\rangle$ de la Ec. (3.23) y $|\psi_R\rangle$ de (3.25) tenemos

$$|\psi_L\rangle = [E - H_L]^{-1}H_{LD}|\psi_D\rangle = g_L H_{LD}|\psi_D\rangle, \quad (3.26)$$

$$|\psi_R\rangle = [E - H_R]^{-1}H_{RD}|\psi_D\rangle = g_R H_{RD}|\psi_D\rangle. \quad (3.27)$$

donde $g_L = [E - H_L]^{-1}$ y $g_R = [E - H_R]^{-1}$ son las funciones de Green asociados a los contactos aislados izquierdo y derecho respectivamente.

Auto-energías

Para obtener la función de Green retardada G_D asociada al nano-dispositivo de la figura 17 hacemos $\epsilon = E + i\eta$ y reescribimos la definición de la función de Green (3.13) correspondiente a la ecuación de Schrödinger es (3.19) como [42, 43]

$$\begin{pmatrix} \epsilon - H_L & -H_{LD} & 0 \\ -H_{DL} & \epsilon - H_D & -H_{DR} \\ 0 & -H_{RD} & \epsilon - H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_L & G_{LD} & G_{LR} \\ G_{DL} & G_D & G_{DR} \\ G_{RL} & G_{RD} & G_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

seleccionando tres ecuaciones de (3.28) tenemos

$$(\epsilon - H_L)G_{LD} - H_{LD}G_D = 0 \quad (3.29)$$

$$-H_{DL}G_{LD} + (\epsilon - H_D)G_D - H_{DR}G_{RD} = I \quad (3.30)$$

$$-H_{RD}G_D + (\epsilon - H_R)G_{RD} = 0 \quad (3.31)$$

obteniendo G_{LD} de (3.29) y G_{RD} de (3.31) y reemplazando en (3.30) se tiene

$$\left[-H_{DL}(\epsilon - H_L)^{-1}H_{LD} + (\epsilon - H_D) - H_{DR}(\epsilon - H_L)^{-1}H_{RD}\right] G_D = I \quad (3.32)$$

considerando las auto-energías asociadas a los contactos como

$$\Sigma_L = H_{DL}g_LH_{LD} \quad (3.33)$$

$$\Sigma_R = H_{DR}g_RH_{RD} \quad (3.34)$$

donde $g_L = (\epsilon - H_L)^{-1}$ y $g_R = (\epsilon - H_R)^{-1}$ son las funciones de Green correspondientes a los contactos izquierdo y derecho aislados, entonces la ecuación (3.32) se escribe como

$$[-\Sigma_L + (\epsilon - H_D) - \Sigma_R]G_D = I, \quad (3.35)$$

luego la función de Green del nano-dispositivo G_D es

$$G_D(E) = (\epsilon I - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1} \quad (3.36)$$

Las matrices de acoplamiento $\Gamma_L(E)$ y $\Gamma_R(E)$ se definen como la diferencia entre las auto-energías avanzadas y retardadas de los correspondientes contactos

$$\Gamma_{L,R} = i(\Sigma_{L,R} - \Sigma_{L,R}^\dagger) \quad (3.37)$$

De acuerdo a la ecuación (3.36) podemos decir que el efecto de los contactos en el dispositivo es adicionar las autoenergías al Hamiltoniano del dispositivo, es decir las autoenergías transforman el sistema completo de la figura 18-a en un nuevo sistema formado por el dispositivo mas autoenergías representado en la figura 18-b. En términos de cálculo computacional en lugar de calcular la función Green del hamiltoniano asociado al sistema completo, calcularemos la función de Green para el hamiltoniano efectivo $H_{ef} = H_D + \Sigma_L + \Sigma_R$. Sin embargo debemos tener en cuenta que este es un proceso para calcular la función de Green, dado que los autovalores y los autovectores de este Hamiltoniano efectivo no son cantidades que se puedan interpretar facilmente.

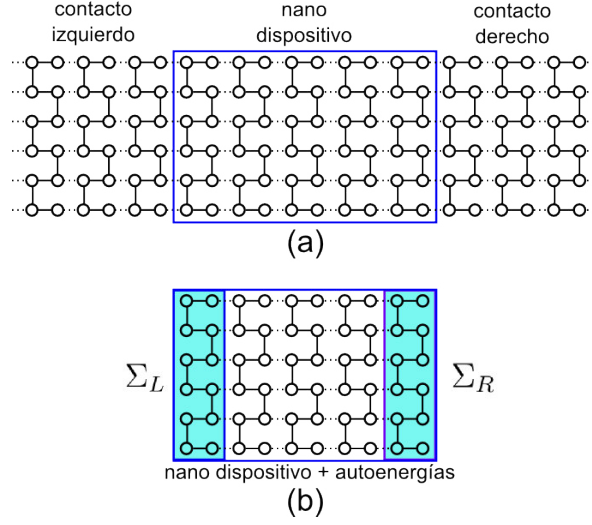


Figura 18: Las autoenergías permite reducir el sistema completo (a) de dimensión infinita a un sistema finito (a) de dimension igual a la del nano-dispositivo.

3.2.3. Coeficiente de transmisión y la función de Green

Deducimos la expresión que nos permite calcular el coeficiente de transmisión en función de las funciones de Green, para ello evaluamos primero la respuesta que produce un nano-dispositivo a las ondas incidentes, considerando que los electrones (ondas incidentes) que se inyectan en el nano-dispositivo ocupan los estados correspondientes a los contactos [44].

Sea $|\psi_{L,n}\rangle$ un estado que corresponde al contacto L que para cierta energía E es reflejado completamente en la interface entre el contacto y el punto cuántico con n un modo de propagación y $|\psi^+\rangle$ el estado retardado obtenido como respuesta del sistema completo, entonces el estado total $|\psi_{L,n}\rangle + |\psi^+\rangle$ satisface la ecuación de Schrödinger

$$H(|\psi_{L,n}\rangle + |\psi^+\rangle) = E(|\psi_{L,n}\rangle + |\psi^+\rangle) \quad (3.38)$$

$$H|\psi_{L,n}\rangle + H|\psi^+\rangle = E(|\psi_{L,n}\rangle + |\psi^+\rangle) \quad (3.39)$$

$$(H_D + H_L + H_{LD} + H_{DL} + H_{DR} + H_{RD} + H_R)|\psi_{L,n}\rangle = (H_L + H_{DL})(|\psi_{L,n}\rangle$$

debido a que $|\psi_{L,n}\rangle$ es una estado que corresponde solo al contacto L

$$\begin{aligned}(H_L + H_{DL})|\psi_{L,n}\rangle + H|\psi^+\rangle &= E(|\psi_{L,n}\rangle + |\psi^+\rangle) \\ (E + H_{DL})|\psi_{L,n}\rangle + H|\psi^+\rangle &= E|\psi_{L,n}\rangle + E|\psi^+\rangle \\ H_{DL}|\psi_{L,n}\rangle + H|\psi^+\rangle &= E|\psi^+\rangle \\ (E - H)|\psi^+\rangle &= H_{DL}|\psi_{L,n}\rangle\end{aligned}$$

luego

$$|\psi^+\rangle = [E - H]^{-1} H_{DL}|\psi_{L,n}\rangle = G H_{DL}|\psi_{L,n}\rangle \quad (3.40)$$

Con este resultado el estado del punto cuántico $|\psi_D\rangle$ se escribe como

$$|\psi_D\rangle = G_D H_{DL}|\psi_{L,n}\rangle. \quad (3.41)$$

Además los estados de los contactos (3.26) y (3.27) se reescriben como:

$$|\psi_L\rangle = (1 + g_L H_{LD} G_D H_{DL})|\psi_{L,n}\rangle \quad (3.42)$$

$$|\psi_R\rangle = g_R H_{RD} G_D H_{DL}|\psi_{L,n}\rangle \quad (3.43)$$

La corriente eléctrica inyectada por el contacto L y pasa al contacto R a través del punto cuántico es dado en función de $|\psi_R\rangle$ y $|\psi_D\rangle$ como:

$$I_{2\leftarrow 1} = -\frac{ie}{\hbar} (\langle \psi_R | H_{RD} | \psi_D \rangle - \langle \psi_D | H_{DR} | \psi_R \rangle) \quad (3.44)$$

reemplazando $|\psi_D\rangle$ y $|\psi_R\rangle$ dadas por (3.41) y (3.43) se tiene

$$\begin{aligned}I_{2\leftarrow 1} &= -\frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_R | H_{RD} G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle - \langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger H_{DR} | \psi_R \rangle \right) \\ &= -\frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger H_{DR} g_R^\dagger H_{RD} G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle - \langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger H_{DR} g_R H_{RD} G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle \right) \\ &= -\frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger \Sigma_R^\dagger G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle - \langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger \Sigma_R G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle \right) \\ &= \frac{e}{\hbar} \langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger i(\Sigma_R - \Sigma_R^\dagger) G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle \\ &= \frac{e}{\hbar} \langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger \Gamma_R G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle. \quad (3.45)\end{aligned}$$

La corriente total que pasa del contacto izquierdo al derecho a través de todos los

modos n , considerando la degeneración de espín es

$$\begin{aligned}
I_{2\leftarrow 1} &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \sum_n \delta(E - E_n) \langle \psi_{L,n} | H_{LD} G_D^\dagger \Gamma_R G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle \\
&= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \sum_{m,n} \delta(E - E_n) \langle \psi_{L,n} | H_{LD} | m \rangle \langle m | G_D^\dagger \Gamma_R G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle \\
&= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \sum_{m,n} \delta(E - E_n) \langle m | G_D^\dagger \Gamma_R G_D H_{DL} | \psi_{L,n} \rangle \langle \psi_{L,n} | H_{LD} | m \rangle \\
&= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \sum_m \langle m | G_D^\dagger \Gamma_R G_D H_{DL} \left(2\pi \sum_n \delta(E - E_n) | \psi_{L,n} \rangle \langle \psi_{L,n} | \right) H_{LD} | m \rangle \\
&= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \sum_m \langle m | G_D^\dagger \Gamma_R G_D H_{DL} \left(g_L - g_L^\dagger \right) H_{LD} | m \rangle \\
&= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \sum_m \langle m | G_D^\dagger \Gamma_R G_D \left(\Sigma_L - \Sigma_L^\dagger \right) | m \rangle \\
&= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \sum_m \langle m | G_D^\dagger \Gamma_R G_D \Gamma_L | m \rangle \\
I_{2\leftarrow 1} &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_L) \text{Tr}[G_D^\dagger \Gamma_R G_D \Gamma_L]. \tag{3.46}
\end{aligned}$$

De manera equivalente se encuentra que la corriente total que pasa del contacto derecho al contacto izquierdo es

$$I_{1\leftarrow 2} = -\frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu_R) \text{Tr}[G_D^\dagger \Gamma_R G_D \Gamma_L]. \tag{3.47}$$

La corriente total a través del punto cuántico es entonces:

$$I = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE (f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)) \text{Tr}[G_D^\dagger \Gamma_R G_D \Gamma_L] \tag{3.48}$$

comparando las corrientes en el punto cuántico dadas por las Ecs. (3.7) y (3.48) se tiene que

$$T(E) = \text{Tr}[G_D^\dagger \Gamma_R G_D \Gamma_L]. \tag{3.49}$$

La Ec. (3.49) es equivalente a la relación de Fisher-Lee [45,46] que expresa el coeficiente de transmisión en términos de las matrices de transmisión como:

$$T = \text{Tr}(\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}). \tag{3.50}$$

3.2.4. Método de decimación

Utilizado para determinar las funciones g_L , g_R y G_D de manera recursiva [47], debido a que los contactos se consideran de dimensión semi-infinita, y el punto cuántico tiene

dimensión finita. La aplicabilidad del método de recurrencia se debe a que tanto los contactos y el nano-dispositivo se pueden descomponer en sub redes verticales finitas en serie como muestra la figura 19, donde cada sub red es llamada en adelante como cadena unidad, dentro del modelo del *tight-binding* cada cadena unidad interactúa solamente con las cadenas unidad laterales próximas.

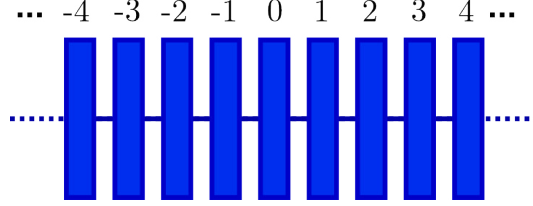


Figura 19: Aproximación de un nanodispositivo utilizando la cadena unidad.

Para la presente deducción consideramos un sistema compuesto por cinco cadenas unidad, que en la figura 19 se denotan por $-2, -1, 0, 1, 2$, siendo el hamiltoniano *tight-binding* asociado dado por

$$H = \begin{pmatrix} H_{-2} & H_{-2,-1} & 0 & 0 & 0 \\ H_{-2,-1}^\dagger & H_{-1} & H_{-1,0} & 0 & 0 \\ 0 & H_{-1,0}^\dagger & H_0 & H_{0,1} & 0 \\ 0 & 0 & H_{0,1}^\dagger & H_1 & H_{1,2} \\ 0 & 0 & 0 & H_{1,2}^\dagger & H_2 \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

donde H_n , con $n = -2, -1, 0, 1, 2$ es el hamiltoniano correspondiente a la n -ésima cadena unidad, $H_{n,n+1}$ es la matriz de acoplamiento de la cadena n con la cadena $n+1$ y $H_{n,n+1}^\dagger$ es la matriz de acoplamiento de la cadena $n+1$ con la cadena n . La función de Green asociado al hamiltoniano (3.51) se define de acuerdo a (3.13) por

$$\begin{pmatrix} \epsilon - H_{-2} & -H_{-2,-1} & 0 & 0 & 0 \\ -H_{-2,-1}^\dagger & \epsilon - H_{-1} & -H_{-1,0} & 0 & 0 \\ 0 & -H_{-1,0}^\dagger & \epsilon - H_0 & -H_{0,1} & 0 \\ 0 & 0 & -H_{0,1}^\dagger & \epsilon - H_1 & -H_{1,2} \\ 0 & 0 & 0 & -H_{1,2}^\dagger & \epsilon - H_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{-2} & G_{-2,-1} & G_{-2,0} & G_{-2,1} & G_{-2,2} \\ G_{-1,-2} & G_{-1} & G_{-1,0} & G_{-1,1} & G_{-1,2} \\ G_{0,-2} & G_{0,-1} & G_0 & G_{0,1} & G_{0,2} \\ G_{1,-2} & G_{1,-1} & G_{1,0} & G_1 & G_{1,2} \\ G_{2,-2} & G_{2,-1} & G_{2,0} & G_{2,1} & G_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

esta ecuación matricial se reescribe como

$$(\epsilon - H_{-2})G_{-2,0} - H_{-2,-1}G_{-1,0} = 0 \quad (3.53)$$

$$-H_{-2,-1}^\dagger G_{-2,0} + (\epsilon - H_{-1})G_{-1,0} - H_{-1,0}G_0 = 0 \quad (3.54)$$

$$-H_{-1,0}^\dagger G_{-1,0} + (\epsilon - H_0)G_0 - H_{0,1}G_{1,0} = 1 \quad (3.55)$$

$$-H_{0,1}^\dagger G_0 + (\epsilon - H_1)G_{1,0} - H_{1,2}G_{2,0} = 0 \quad (3.56)$$

$$-H_{1,2}^\dagger G_{1,0} + (\epsilon - H_2)G_{2,0} = 0 \quad (3.57)$$

De la Ec. (3.57) obtenemos la función $G_{2,0}$

$$G_{2,0} = (\epsilon - H_2)^{-1} H_{1,2}^\dagger G_{1,0}$$

y sustituimos en la Ec. (3.56)

$$-H_{0,1}^\dagger G_0 + (\epsilon - H_1)G_{1,0} - H_{1,2}(\epsilon - H_2)^{-1} H_{1,2}^\dagger G_{1,0} = 0$$

obteniendo $G_{1,0}$ tenemos

$$G_{1,0} = (\epsilon - H_1 - H_{1,2}(\epsilon - H_2)^{-1} H_{1,2}^\dagger)^{-1} H_{0,1}^\dagger G_0 \quad (3.58)$$

Asimismo de la ecuación (3.53) obtenemos la función $G_{-2,0}$

$$G_{-2,0} = (\epsilon - H_{-2})^{-1} H_{-2,-1}G_{-1,0}$$

y sustituimos en la Ec. (3.54)

$$-H_{-2,-1}^\dagger (\epsilon - H_{-2})^{-1} H_{-2,-1}G_{-1,0} + (\epsilon - H_{-1})G_{-1,0} - H_{-1,0}G_0 = 0$$

obteniendo $G_{-1,0}$ tenemos

$$G_{-1,0} = (\epsilon - H_{-1} - H_{-2,-1}^\dagger (\epsilon - H_{-2})^{-1} H_{-2,-1})^{-1} H_{-1,0}G_0 \quad (3.59)$$

sustituyendo (3.58) y (3.59) en la Ec. (3.55) tenemos

$$\begin{aligned} & -H_{-1,0}^\dagger (\epsilon - H_{-1} - H_{-2,-1}^\dagger (\epsilon - H_{-2})^{-1} H_{-2,-1})^{-1} H_{-1,0}G_0 + (\epsilon - H_0)G_0 \\ & -H_{0,1}(\epsilon - H_1 - H_{1,2}(\epsilon - H_2)^{-1} H_{1,2}^\dagger)^{-1} H_{0,1}^\dagger G_0 = 0 \end{aligned}$$

de aquí obtenemos que la función de Green G_0 se expresa como

$$G_0 = \left[\begin{array}{cc} \epsilon - H_0 - H_{-1,0}^\dagger \frac{1}{\epsilon - H_1 - H_{-2,-1}^\dagger \frac{1}{\epsilon - H_{-2}} H_{-2,-1}} H_{-1,0} & -H_{0,1} \frac{1}{\epsilon - H_1 - H_{1,2} \frac{1}{\epsilon - H_2} H_{1,2}^\dagger} H_{0,1}^\dagger \end{array} \right]^{-1} \quad (3.60)$$

Para el cálculo de G_D esta recursión se extiende hasta el tamaño del punto cuántico, y en el cálculo de g_L y g_R se considera hasta un tamaño suficientemente grande.

3.2.5. Funciones de Green de contacto derecho

En la bibliografía existen varios métodos recursivos para determinar las funciones de Green de los contactos, así tenemos el método auto-consistente [46], el método de decimación [23, 48, 49]. Nosotros utilizamos una variante del método de la matriz de transferencia [50–52], para calcular de manera rápida y eficiente la función de Green del contacto derecho, la particularidad de este método es que se aplica cuando los hamiltonianos asociados a cada una de las cadenas unidad del contacto derecho son todas iguales. Para el presente cálculo consideramos que el contacto derecho es una red semi-infinita, que de acuerdo a la figura 19 es representado por las cadenas unidad $n = 0, 1, 2, \dots$ de modo que la ecuación (3.13) que define la función de Green del contacto derecho se escribe como:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - H_{00} & -H_{01} & 0 & 0 & \dots \\ -H_{01}^\dagger & \epsilon - H_{11} & -H_{12} & 0 & \dots \\ 0 & -H_{12}^\dagger & \epsilon - H_{22} & -H_{23} & \dots \\ 0 & 0 & -H_{23}^\dagger & \epsilon - H_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{00} & G_{01} & G_{02} & G_{03} & \dots \\ G_{10} & G_{11} & G_{12} & G_{13} & \dots \\ G_{20} & G_{21} & G_{22} & G_{23} & \dots \\ G_{30} & G_{31} & G_{32} & G_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.61)$$

considerando que $H_{01} = H_{n,n+1}$, $H_{10} = H_{n+1,n}$ y $H_{nn} = H_{00}$ para todo n tenemos

$$(\epsilon - H_{00})G_{00} - H_{01}G_{10} = I \quad (3.62)$$

$$-H_{10}G_{00} + (\epsilon - H_{00})G_{10} - H_{01}G_{20} = 0 \quad (3.63)$$

$$-H_{10}G_{10} + (\epsilon - H_{00})G_{20} - H_{01}G_{30} = 0 \quad (3.64)$$

$$-H_{10}G_{20} + (\epsilon - H_{00})G_{30} - H_{01}G_{40} = 0 \quad (3.65)$$

$$-H_{10}G_{30} + (\epsilon - H_{00})G_{40} - H_{01}G_{50} = 0 \quad (3.66)$$

$$-H_{10}G_{40} + (\epsilon - H_{00})G_{50} - H_{01}G_{60} = 0 \quad (3.67)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad (3.68)$$

despejando G_{10} de (3.63) tenemos

$$G_{10} = (\epsilon - H_{00})^{-1}(H_{10}G_{00} + H_{01}G_{20}) \quad (3.69)$$

reemplazando (3.69) en (3.62) encontramos G_{00}

$$(\epsilon - H_{00})G_{00} - H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}(H_{10}G_{00} + H_{01}G_{20}) = I$$

$$(\epsilon - H_{00} - H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10})G_{00} = I + H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{01}G_{20} \quad (3.70)$$

Despejando ahora G_{30} de (3.65) se obtiene

$$G_{30} = (\epsilon - H_{00})^{-1}(H_{10}G_{20} + H_{01}G_{40}) \quad (3.71)$$

reemplazando (3.69) y (3.71) en (3.64) tenemos

$$-H_{10}[(\epsilon - H_{00})^{-1}(H_{10}G_{00} + H_{01}G_{20})] + (\epsilon - H_{00})G_{20} - H_{01}[(\epsilon - H_{00})^{-1}](H_{10}G_{20} + H_{01}G_{40}) = 0$$

reordenando

$$\begin{aligned} & [\epsilon - H_{00} - H_{10}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10} - H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10}]G_{20} \\ & = H_{10}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10}G_{00} + H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10}G_{40} \end{aligned} \quad (3.72)$$

haciendo el cambio de variables

$$\begin{aligned} H_1 &= H_{00} + H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10} \\ \beta_1 &= H_{10}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10} \\ \alpha_1 &= H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{01} \\ H'_1 &= H_{00} + H_{10}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{01} + H_{01}(\epsilon - H_{00})^{-1}H_{10} \end{aligned}$$

las ecuaciones (3.70) y (3.72) se reescriben como

$$(\epsilon - H_1)G_{00} = I + \alpha_1 G_{20} \quad (3.73)$$

$$(\epsilon - H'_1)G_{20} = \beta_1 G_{00} + \alpha_1 G_{40} \quad (3.74)$$

si despejamos G_{50} de (3.67) y tomamos G_{30} de (3.71) para reemplazar en (3.66) y seguir el mismo procedimiento seguido para deducir (3.74) encontramos

$$(\epsilon - H'_1)G_{40} = \beta_1 G_{20} + \alpha_1 G_{60} \quad (3.75)$$

así mismo encontramos que

$$(\epsilon - H'_1)G_{60} = \beta_1 G_{40} + \alpha_1 G_{80} \quad (3.76)$$

$$(\epsilon - H'_1)G_{80} = \beta_1 G_{60} + \alpha_1 G_{10} \quad (3.77)$$

$$(\epsilon - H'_1)G_{10} = \beta_1 G_{80} + \alpha_1 G_{12} \quad (3.78)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad (3.79)$$

Para hacer una segunda iteración despejamos G_{20} de (3.74) y reemplazamos en (3.73) obteniendo

$$(\epsilon - H_1)G_{00} = I + \alpha_1((\epsilon - H'_1)^{-1}(\beta_1 G_{00} + \alpha_1 G_{40}))$$

$$(\epsilon - H_1 - \alpha_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\beta_1)G_{00} = I + \alpha_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\alpha_1 G_{40} \quad (3.80)$$

despejando G_{20} de (3.74) y G_{60} de (3.76) y reemplazando ese obtiene

$$(\epsilon - H'_1)G_{40} = \beta_1((\epsilon - H'_1)^{-1}(\beta_1 G_{00} + \alpha_1 G_{40})) + \alpha_1((\epsilon - H'_1)^{-1}(\beta_1 G_{40} + \alpha_1 G_{80}))$$

$$(\epsilon - H'_1 - \beta_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\alpha_1 - \alpha_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\beta_1)G_{40} = \beta_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\beta_1 G_{00} + \alpha_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\alpha_1 G_{80} \quad (3.81)$$

haciendo el cambio de variable

$$H_2 = H_1 + \alpha_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\beta_1$$

$$\beta_2 = \beta_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\beta_1$$

$$\alpha_2 = \alpha_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\alpha_1$$

$$H'_2 = H'_1 + \beta_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\alpha_1 + \alpha_1(\epsilon - H'_1)^{-1}\beta_1$$

escribimos (3.80) y (3.81) como

$$(\epsilon - H_2)G_{00} = I + \alpha_2 G_{40} \quad (3.82)$$

$$(\epsilon - H'_2)G_{40} = \beta_2 G_{00} + \alpha_2 G_{80} \quad (3.83)$$

de manera similar encontramos

$$(\epsilon - H'_2)G_{80} = \beta_2 G_{40} + \alpha_2 G_{12} \quad (3.84)$$

$$(\epsilon - H'_2)G_{12} = \beta_2 G_{40} + \alpha_2 G_{12} \quad (3.85)$$

$$(\epsilon - H'_2)G_{16} = \beta_2 G_{80} + \alpha_2 G_{16} \quad (3.86)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad (3.87)$$

De acuerdo a las ecuaciones de la primera iteración (3.73) al (3.78) y las ecuaciones de la segunda iteración (3.80) al (3.86), después de la n -ésima iteración tendremos

$$(\epsilon - H_n)G_{00} = I + \alpha_n G_{2^n,0} \quad (3.88)$$

$$(\epsilon - H'_n)G_{2^n,0} = \beta_n G_{00} + \alpha_n G_{2*2^n,0} \quad (3.89)$$

$$(\epsilon - H'_n)G_{2*2^n,0} = \beta_2 G_{2^n,0} + \alpha_2 G_{3*2^n,0} \quad (3.90)$$

$$(\epsilon - H'_n)G_{3*2^n,0} = \beta_2 G_{1*2^n,0} + \alpha_2 G_{4*2^n,0} \quad (3.91)$$

$$(\epsilon - H'_n)G_{4*2^n,0} = \beta_2 G_{2*2^n,0} + \alpha_2 G_{5*2^n,0} \quad (3.92)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad (3.93)$$

con

$$H_n = H_{n-1} + \alpha_{n-1}(\epsilon - H'_{n-1})^{-1}\beta_{n-1} \quad (3.94)$$

$$\beta_n = \beta_{n-1}(\epsilon - H'_{n-1})^{-1}\beta_{n-1} \quad (3.95)$$

$$\alpha_n = \alpha_{n-1}(\epsilon - H'_{n-1})^{-1}\alpha_{n-1} \quad (3.96)$$

$$H'_n = H'_{n-1} + \beta_{n-1}(\epsilon - H'_{n-1})^{-1}\alpha_{n-1} + \alpha_{n-1}(\epsilon - H'_{n-1})^{-1}\beta_{n-1}. \quad (3.97)$$

Si el número de iteraciones n es suficientemente grande entonces se encuentra que α_n es considerablemente pequeña, de modo que la función de Green aproximada del contacto derecho es dado por:

$$G_{00} \approx (\epsilon - H_n)^{-1}. \quad (3.98)$$

3.3. Formalismo de Buttiker para 4 contactos

Buttiker realiza una extensión al formalismo de Landauer que describe el transporte electrónico de nano-dispositivos con dos contactos a sistemas cuánticos con cuatro terminales [53,54], en general este tratamiento se puede extender a más terminales. En principio consideramos un sistema multiterminal, donde cada contacto α tiene varios canales permitidos M_α , entonces la ecuación (3.7) para corriente total I_α en el contacto α se generaliza como:

$$I_\alpha = \frac{2e}{h} \int dE \left[(M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) f_\alpha - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} f_\beta \right] \quad (3.99)$$

el factor 2 se debe a la degeneración del espín, si expandimos f_β y f_α al rededor del nivel de Fermi como

$$f_\alpha(\mu_\alpha) = f(\mu_F) + \left(\frac{df}{dE} \right) eV_\alpha + \dots$$

considerando la aproximación hasta el primer orden, la ecuación (3.99) se escribe como

$$\begin{aligned} I_\alpha &= \frac{2e}{h} \int dE \left[(M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) \left(f(\mu_F) + \left(\frac{df}{dE} \right) eV_\alpha \right) - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} \left(f(\mu_F) + \left(\frac{df}{dE} \right) eV_\beta \right) \right] \\ I_\alpha &= \frac{2e}{h} \int dE \left[f(\mu_F) \left((M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} \right) + (M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) \left(\frac{df}{dE} \right) eV_\alpha - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} \left(\frac{df}{dE} \right) eV_\beta \right] \end{aligned}$$

La conservación de corriente en el contacto α y la simetría de la conducción eléctrica [54] nos permite escribir:

$$(M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} = 0, \quad (M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta\alpha} = 0 \quad (3.100)$$

luego I_α es

$$I_\alpha = \frac{2e}{h} \int dE \left[(M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) \left(\frac{df}{dE} \right) eV_\alpha - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} \left(\frac{df}{dE} \right) eV_\beta \right] \quad (3.101)$$

asumiendo que

$$G_{\alpha\alpha} = \frac{2e^2}{h} \int dE \left(\frac{df}{dE} \right) (M_\alpha - R_{\alpha\alpha}); \quad G_{\alpha\beta} = -\frac{2e^2}{h} \int dE \left(\frac{df}{dE} \right) T_{\alpha\beta} \quad (3.102)$$

tenemos

$$I_\alpha = \frac{2e^2}{h} \sum_{\beta} G_{\alpha\beta} V_\beta. \quad (3.103)$$

a bajas temperaturas $G_{\alpha\alpha}$ y $G_{\alpha\beta}$ dados por (3.102) se expresa como

$$G_{\alpha\alpha} = \frac{2e^2}{h} (M_\alpha - R_{\alpha\alpha}); \quad G_{\alpha\beta} = -\frac{2e^2}{h} T_{\alpha\beta} \quad (3.104)$$

Para un punto cuántico con cuatro contactos a bajas temperaturas la corriente I_α en el contacto α ($\alpha = 1, 2, 3, 4$) dado por (3.103) es

$$I_\alpha = \frac{2e^2}{h} \left[(M_\alpha - R_{\alpha\alpha}) V_\alpha - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} V_\beta \right], \quad (3.105)$$

cabe recalcar en esta parte que M_α es el número de canales permitidos a través del contacto α , es decir que $R_{\alpha\alpha} = \sum R_{\alpha\alpha}^n$ es la probabilidad total de reflexión de las ondas incidentes por los M_α canales permitidos en el contacto α , así mismo $T_{\alpha\beta} = \sum T_{\alpha\beta}^n$ es el coeficiente de transmisión total de las ondas que inciden por el contacto α y pasan al contacto β .

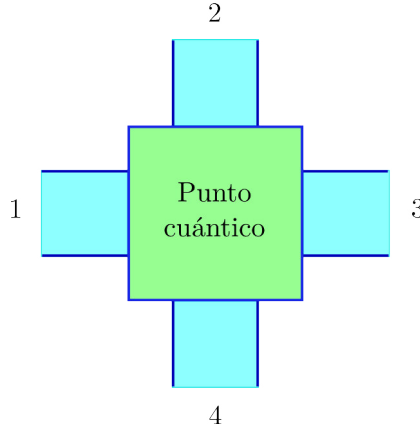


Figura 20: Punto cuántico con cuatro contactos.

Considerando que toda la corriente que ingresa a través del contacto 1 pasa al contacto 3 y toda la corriente que ingresa por el contacto 2 pasa al 4, es decir $I_1 = -I_3$

y $I_2 = -I_4$ a partir de (3.105) encontramos que

$$V_3 - V_4 = \frac{T_{12} + T_{32}}{S}(V_2 - V_4) - \frac{T_{41} + T_{21}}{S}(V_1 - V_3), \quad (3.106)$$

$$S = T_{12} + T_{14} + T_{32} + T_{34} = T_{21} + T_{41} + T_{23} + T_{43} \quad (3.107)$$

con estas identidades reescribimos la ecuación (3.105) como

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \end{pmatrix} = \frac{2e^2}{h} \begin{pmatrix} \gamma_{11} & -\gamma_{12} \\ -\gamma_{21} & \gamma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 - V_3 \\ V_2 - V_4 \end{pmatrix} \quad (3.108)$$

donde

$$\gamma_{11} = (M_1 - R_{11}) - \frac{(T_{21} + T_{41})(T_{12} + T_{14})}{S} \quad (3.109)$$

$$\gamma_{12} = \frac{T_{12}T_{34} - T_{32}T_{14}}{S} \quad (3.110)$$

$$\gamma_{21} = \frac{T_{21}T_{43} - T_{23}T_{41}}{S} \quad (3.111)$$

$$\gamma_{22} = (M_2 - R_{22}) - \frac{(T_{21} + T_{23})(T_{32} + T_{12})}{S} \quad (3.112)$$

para la medida de la resistencia Hall, consideramos $I_2 = 0$ en los contactos 2 y 4, de modo que (3.108) se reescribe como

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{2e^2}{h} [\gamma_{11}(V_1 - V_3) - \gamma_{12}(V_2 - V_4)] \\ 0 &= \frac{2e^2}{h} [-\gamma_{21}(V_1 - V_3) + \gamma_{22}(V_2 - V_4)] \end{aligned}$$

resolviendo para I_1 encontramos

$$I_1 = \frac{2e^2}{h} \left[\gamma_{11} \frac{\gamma_{22}}{\gamma_{21}} (V_2 - V_4) - \gamma_{12}(V_2 - V_4) \right] = \frac{2e^2}{h} \frac{\gamma_{11}\gamma_{22} - \gamma_{21}\gamma_{12}}{\gamma_{21}} (V_2 - V_4)$$

entonces la resistencia Hall R_H es

$$R_H = R_{13,24} = \frac{V_2 - V_4}{I_1} = \frac{h}{2e^2} \frac{\gamma_{21}}{\gamma_{11}\gamma_{22} - \gamma_{21}\gamma_{12}} \quad (3.113)$$

y la resistencia longitudinal R_L es

$$R_L = \frac{V_1 - V_3}{I_1} = \frac{h}{2e^2} \frac{\gamma_{22}}{\gamma_{11}\gamma_{22} - \gamma_{21}\gamma_{12}} \quad (3.114)$$

En las figuras 21, 22 y 23 presentamos los resultados de R_H , R_L y DOS para un punto cuántico de grafeno formado por una red finita de dimensiones $23a \times \frac{21}{2}\sqrt{3}a$,

siendo el ancho de los contactos izquierdo (1) y derecho (3) igual a $23a$ y el ancho de los contactos superior (2) e inferior (4) igual a $\frac{21}{2}\sqrt{3}a$. El campo magnético uniforme aplicado sobre el sistema es representado por el potencial vector $\mathbf{A} = -B_0 y \hat{x}$ y su efecto sobre el punto cuántico es dado por la sustitución de Pierls. Para fines de obtener los resultados calculamos primero las funciones de Green de los contactos por medio del método recursivo rápido descrito en 3.2.5, luego calculamos las auto-energías y las acoplamos al punto cuántico siguiendo las matrices de transformación propuestas por Jayasekera [55], seguidamente determinamos la función de Green, finalmente utilizando la función de Green calculamos la resistencia Hall R_H por medio de la ecuación (3.113), la resistencia longitudinal R_L usando la ecuación (3.114) y DOS respectivamente, el programa numérico utilizado para estos cálculos es la que proponemos en [56]. Otra alternativa de tratamiento de las auto-energías para sistema nanoscópicos mas grandes es utilizar las propuestas de Thorgilsson [57].

La figura 21 representa el diagrama de colores de la resistencia Hall obtenida a partir de (3.113) en la gráfica el eje horizontal representa el flujo magnético por unidad de flujo cuántico y el eje vertical la energía (E/t), los colores cálidos representan los valores positivos que toma R_H y los colores frios los valores negativos de R_H , la gráfica muestra también la naturaleza anti-simétrica de R_H respecto a $E = 0$. Así mismo observamos la formación de los niveles de Landau, niveles que se aprecian mejor en la gráfica de la DOS dada en la figura 23 y en la resistencia longitudinal R_L dado por (3.114) y representado en la figura 22. La presencia de los niveles de Landau se deben a la localización de los estados de borde en determinados valores de energía a medida que el aumenta el campo magnético y son indicadores que prueban la cuantización de R_H en el punto cuántico estudiado. La cuantización de R_H es mas notoria a medida que las dimensiones del punto cuántico se incrementan, ya que cuando las dimensiones del punto cuántico son muy pequeñas los efectos de cuantización espacial son mas preponderantes.

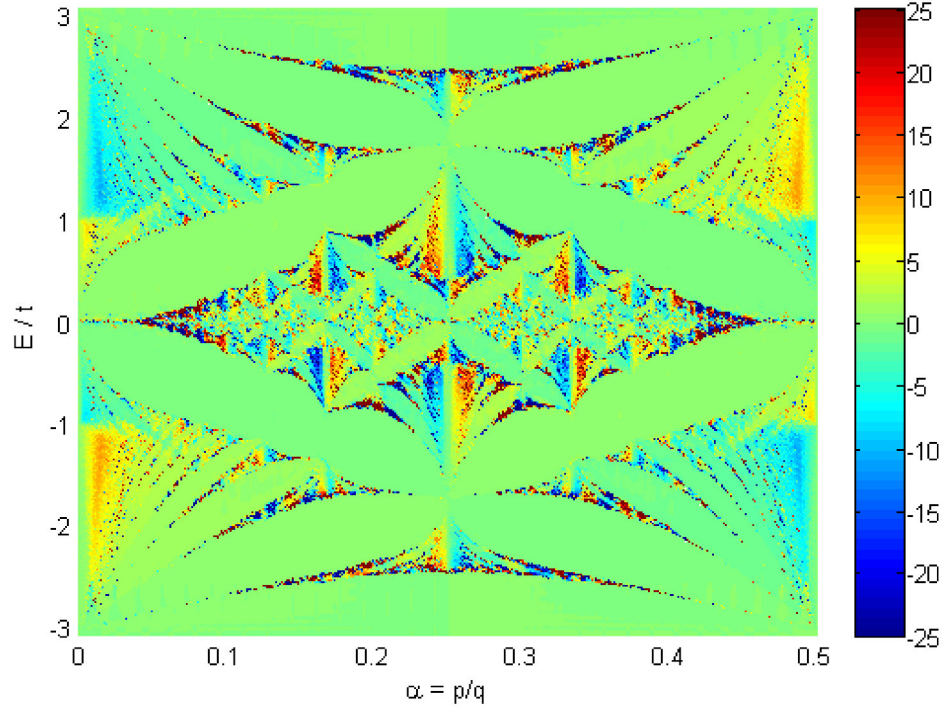


Figura 21: Resistencia Hall R_H dado por la ecuación (3.113) para un punto cuántico de Grafeno con cuatro contactos

En la figura 22 los colores cálidos representan valores positivos de R_L y los colores fríos los valores negativos de R_L , así mismo se observa que R_L tiene propiedades simétricas respecto a $E = 0$ a diferencia de R_H . La figura 23 es el diagrama de colores de la densidad de estados del punto cuántico que muestra claramente la presencia de los niveles de Landau y la concentración de los estados de borde en los niveles de Landau.

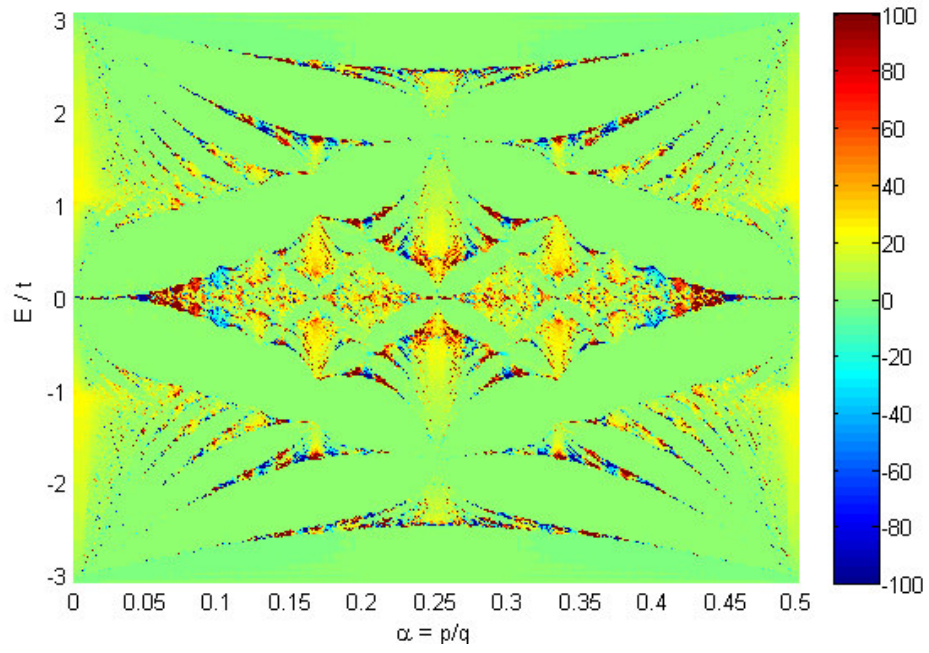


Figura 22: Resistencia longitudinal R_L dado por la ecuación (3.114) para un punto cuántico de Grafeno con cuatro contactos

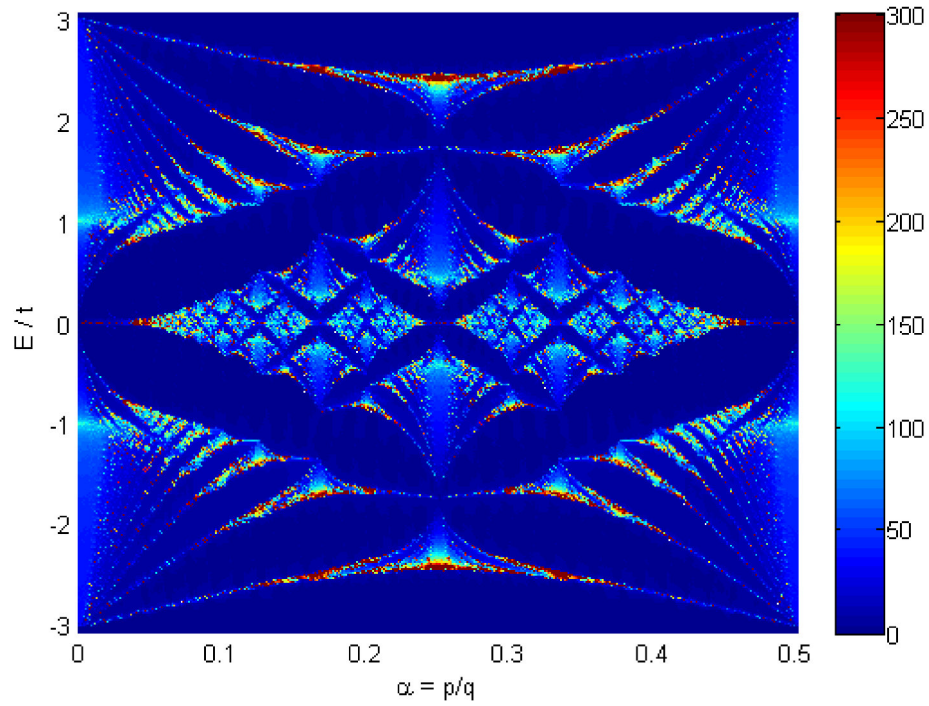


Figura 23: Densidad de estados de punto cuántico de Grafeno con cuatro contactos

Capítulo 4

Nanoribbons de grafeno

Los nanoribbons de grafeno son bandas (cintas) de grafeno con anchos muy pequeños (< 50 nm) como muestra la figura 24. En estos sistemas la distribución de los átomos en los bordes del nanoribbons juegan un rol importante en la caraterización de sus propiedades electrónicas. En el presente estudio clasificamos los bordes de los nanoribbons de grafeno en bordes *zigzag*, *armchair* y *bearded* (barbado) como se muestra en la figura 25 [19, 27, 58, 59]. A continuación describimos analíticamente la estructura electrónica y los estados electrónicos de nanoribbons de borde *zigzag* y *armchair* utilizando la ecuación de Dirac y el modelo de *tight-binding*, calculamos la conductancia eléctrica y analizamos el efecto del campo magnético sobre los nanoribbons de diferentes bordes.

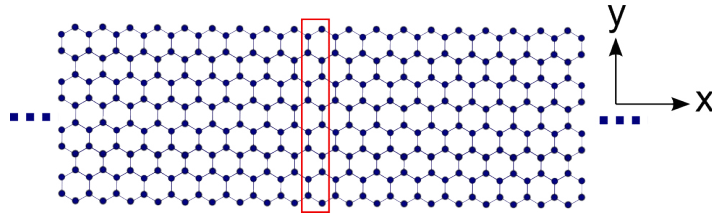


Figura 24: Nanoribbons de borde zigzag con ancho finito en el eje y .

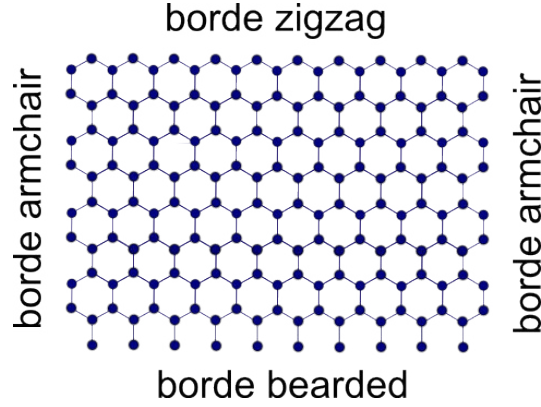


Figura 25: Red finita de grafeno que muestra los tipos de borde zigzag, armchair y bearded utilizados en la descripción de los nanoribbons.

Para obtener la estructura de bandas y eigen-funciones de los nanoribbons reescribimos el hamiltoniano (2.33) en términos del vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ al rededor de los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' como

$$H = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y & 0 & 0 \\ k_x + ik_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(k_x + ik_y) \\ 0 & 0 & -(k_x - ik_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Las soluciones a la ecuación de Dirac para el hamiltoniano (4.1) se expresan como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_K(\mathbf{r}) \\ \psi_{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

donde ψ_K y $\psi_{K'}$ son los espinores asociados a los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , las funciones ψ_K y $\psi_{K'}$ tienen cada una dos componentes denotados por ψ_K^A , ψ_K^B y $\psi_{K'}^A$, $\psi_{K'}^B$ respectivamente. Los superíndices A y B en las componentes de los espinores representan a las subredes A y B del grafeno, de modo que la función de onda total de la nanocinta se expresa como

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \phi^A(\mathbf{r}) \\ \phi^B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} \psi_K^A(\mathbf{r}) \\ \psi_K^B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} + e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} \psi_{K'}^A(\mathbf{r}) \\ \psi_{K'}^B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

en el tratamiento siguiente consideramos que el ancho de la nanocinta se encuentra en el eje y y su longitud considerada infinita se encuentra a lo largo del eje x , de modo

que debido a la invariancia traslacional en el eje x las funciones de onda deben cumplir la condición de Bloch

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} \psi(y). \quad (4.4)$$

4.1. Estructura electrónica de nanoribbons de grafeno zigzag

Analizamos la estructura electrónica del nanoribbons de borde zigzag de ancho $W = \left(\frac{3N}{2} - 1\right) a$, con N número de dímeros en la cadena unidad mostrado en la figura 24. Haciendo que $ik_y \rightarrow \partial_y$ la ecuación de Dirac para el hamiltoniano (4.1) se escribe como

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - \partial_y & 0 & 0 \\ k_x + \partial_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(k_x + \partial_y) \\ 0 & 0 & -(k_x - \partial_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_K^A \\ \psi_K^B \\ \psi_{K'}^A \\ \psi_{K'}^B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_K^A \\ \psi_K^B \\ \psi_{K'}^A \\ \psi_{K'}^B \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

de (4.5) las ecuaciones para evaluar ψ_K^A y ψ_K^B en el punto \mathbf{K} son

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - \partial_y \\ k_x + \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_K^A \\ \psi_K^B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_K^A \\ \psi_K^B \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} (k_x - \partial_y) \psi_K^B &= \tilde{\varepsilon} \psi_K^A \\ (k_x + \partial_y) \psi_K^A &= \tilde{\varepsilon} \psi_K^B \end{aligned} \quad (4.7)$$

con $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon / \hbar v_F$, desacoplando las ecuaciones

$$\psi_K^A = \frac{1}{\tilde{\varepsilon}} (k_x - \partial_y) \psi_K^B \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} (k_x + \partial_y) \frac{1}{\tilde{\varepsilon}} (k_x - \partial_y) \psi_K^B &= \tilde{\varepsilon} \psi_K^B \\ (k_x^2 - \partial_y^2) \psi_K^B &= \tilde{\varepsilon}^2 \psi_K^B \\ \partial_y^2 \psi_K^B + (\tilde{\varepsilon}^2 - k_x^2) \psi_K^B &= 0, \end{aligned} \quad (4.9)$$

la solución general de la ecuación (4.9) es

$$\psi_K^B(y) = \alpha e^{\gamma y} + \beta e^{-\gamma y} \quad (4.10)$$

con $\gamma = \sqrt{k_x^2 - \tilde{\varepsilon}^2}$ que puede ser real o imaginario. Reemplazando $\psi_K^B(y)$ en (4.7), se obtiene que $\psi_k^A(y)$ es

$$\psi_K^A(y) = \alpha(k_x - \gamma)e^{\gamma y} + \beta(k_x + \gamma)e^{-\gamma y} \quad (4.11)$$

Debido a que el ancho del nanoribbon en el eje y es finita, asumimos que los bordes están dados por $y = 0$ y $y = W$, entonces las funciones de onda deben satisfacer

$$\phi^B(y = 0) = 0, \quad \phi^A(y = W) = 0 \quad (4.12)$$

La condición $\phi^B(y = 0) = 0$ se asume debido al hecho de la frontera $y = 0$ del nanoribbon está constituida por átomos de la subred B y la condición $\phi^A(y = W) = 0$ debido a que la frontera $y = W$ del nanoribbon es constituida por átomos de la subred A . la aplicación de estas condiciones de frontera a la Ec. (4.3) conduce a la expresión

$$0 = \begin{pmatrix} \phi^B(y = 0) \\ \phi^A(y = W) \end{pmatrix} = e^{iKx} \begin{pmatrix} \psi_K^B(y = 0) \\ \psi_K^A(y = W) \end{pmatrix} + e^{iK'x} \begin{pmatrix} \psi_{K'}^B(y = 0) \\ \psi_{K'}^A(y = W) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} 0 &= e^{iKx}\psi_K^B(y = 0) + e^{iK'x}\psi_{K'}^B(y = 0) \\ 0 &= e^{iKx}\psi_K^A(y = W) + e^{iK'x}\psi_{K'}^A(y = W) \end{aligned}$$

condiciones que se verifican si

$$\psi_K^B(y = 0) = \psi_{K'}^B(y = 0) = \psi_K^A(y = W) = \psi_{K'}^A(y = W) = 0 \quad (4.13)$$

haciendo que (4.10) verifique $\psi_K^B(y = 0) = 0$ se tiene

$$\begin{aligned} \psi_K^B(y = 0) = 0 &= \alpha e^{\gamma(0)} + \beta e^{-\gamma(0)} \\ \alpha &= -\beta \end{aligned}$$

luego usando $\psi_K^A(y = W) = 0$ en (4.11) tenemos

$$\begin{aligned} \psi_K^A(y = W) = 0 &= \alpha(k_x - \gamma)e^{\gamma W} + \beta(k_x + \gamma)e^{-\gamma W} \\ 0 &= \alpha(k_x - \gamma)e^{\gamma W} - \alpha(k_x + \gamma)e^{-\gamma W} \end{aligned}$$

quedando la ecuación trascendental

$$\frac{k_x - \gamma}{k_x + \gamma} = e^{-2\gamma W}. \quad (4.14)$$

La ecuación (4.14) tiene soluciones reales para γ si $k_x > 1/W$, soluciones que corresponden a funciones de estado de borde (edge states) localizados en la frontera del nanoribbon, con energías

$$\tilde{\varepsilon} = \pm \sqrt{k_x^2 - \gamma^2}, \quad (4.15)$$

el resultado (4.15) no puede ser predicho a partir de la estructura de bandas del grafeno.

En otro caso si $k_x < 1/W$ las soluciones de la Ec. (4.14) son puramente complejas de la forma $\gamma = ik_n$, entonces

$$\begin{aligned}\frac{k_x - ik_n}{k_x + ik_n} &= e^{-2ik_n W} \\ (k_x - ik_n)e^{ik_n W} &= (k_x + ik_n)e^{-ik_n W} \\ k_x(e^{ik_n W} - e^{-ik_n W}) &= ik_n(e^{ik_n W} + e^{-ik_n W}) \\ k_x \sin(k_n W) &= k_n \cos(k_n W)\end{aligned}$$

quedando

$$k_x = \frac{k_n}{\tan(k_n W)} \quad (4.16)$$

las soluciones de (4.16) corresponden a estados confinados en la nanocinta, que tienen energías

$$\tilde{\varepsilon} = \pm \sqrt{k_x^2 + k_n^2} \quad (4.17)$$

4.1.1. Método del *tight-binding*

La dispersión de energía de los nanoribbons dentro del modelo del *tight-binding* describe de manera eficiente su estructura de bandas. El hamiltoniano asociado a los nanoribbons se escribe de manera equivalente al hamiltoniano (2.3) del grafeno, utilizando como condición de frontera que las funciones de onda en los bordes del nanoribbons se anulan, como en la ecuación (4.12). De acuerdo a la idea propuesta por Lee y Joannopoulos [60, 61] para el cálculo de funciones de Green de conductores semi-infinitos, consideramos que el nanoribbons se encuentra formada por cadenas verticales finitas, siendo la cadena unidad del nanoribbons zigzag representada dentro del rectángulo rojo en la figura 24, cada cadena unidad se repite periódicamente a lo largo del eje del nanoribbons (eje x) e interactúa con las cadenas laterales y vecinas a la izquierda y derecha, de modo que el hamiltoniano del nanoribbons N -zgnr es expresado por la matriz de dimensión $2N \times 2N$ siguiente

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 2t \cos(k_x a) & 0 & t & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & t & 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & t & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & 2t \cos(k_x a) & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

La estructura de bandas del nanoribbons zigzag calculadas diagonalizando el hamiltoniano (4.18) se ilustra en la figura 26 para seis diferentes anchos del nanoribbons. Los resultados muestran que la cantidad de estados permitidos para cada energía depende directamente del ancho de los nanoribbons. Otro aspecto importante que se observa en los nanoribbons de borde zigzag es su comportamiento metálico independientemente del ancho del nanoribbons [35, 62, 63].

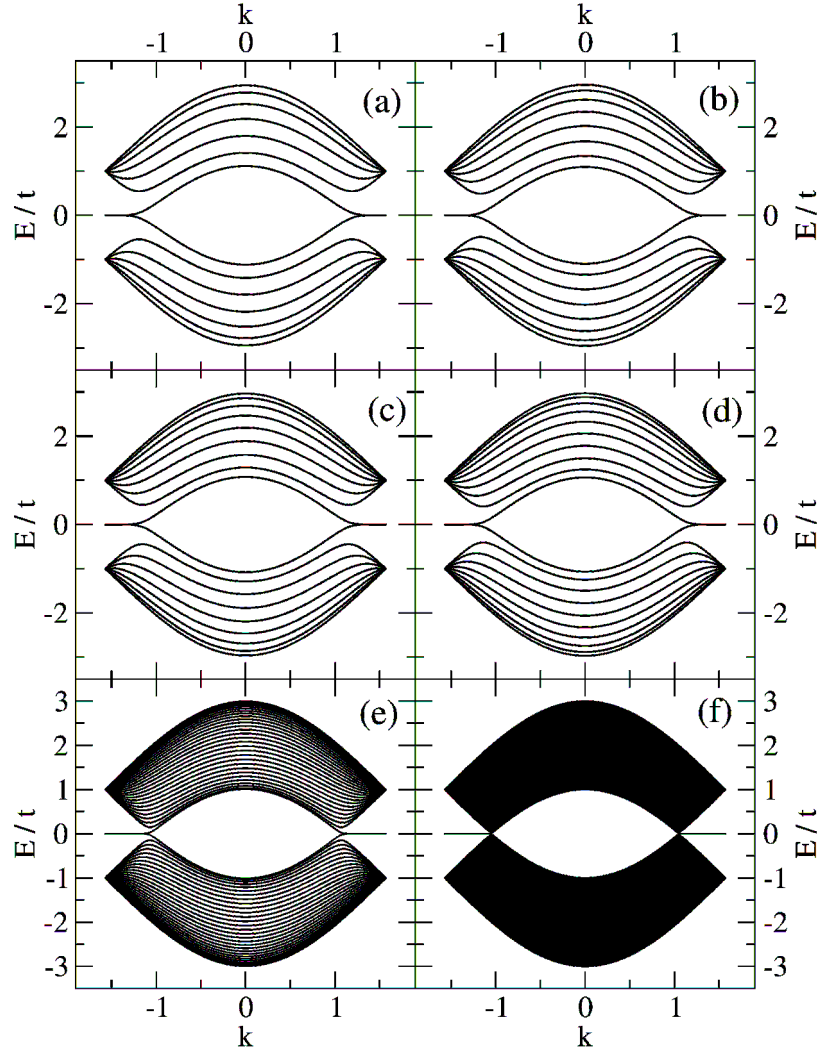


Figura 26: Espectro de energía de nanoribbons de diferentes anchos (a) 7-zgnr, (b) 8-zgnr, (c) 9-zgnr, (d) 10-zgnr, (e) 30-zgnr y (f) 100-zgnr

4.2. Estructura electrónica de nanoribbons Armchair

Analizamos nanoribbons armchair de ancho $W = (N - 1) \frac{\sqrt{3}}{2} a$, donde N es el número de dímeros en la cadena unidad mostrado en la figura 27, así mismo consideramos que los bordes del nanoribbons son dados por $y = 0$ y $y = W$, en estas fronteras de acuerdo a rotación en $\pi/2$ de la figura 3 tendremos átomos de las subredes A y B simultáneamente.

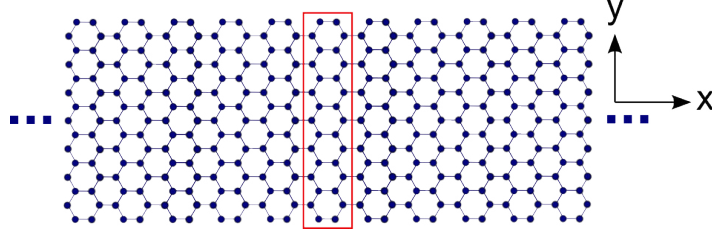


Figura 27: Nanoribbons de borde armchair con ancho en la dirección del eje y .

La deducción del hamiltoniano de Dirac (4.1) se hizo considerando que el borde del nanoribbon era la dirección zigzag, entonces para el estudio de nanoribbons armchair introducimos una rotación de $\pi/2$ en el vector de onda, es decir hacemos $k_x \rightarrow -k_y$ y $k_y \rightarrow k_x$, luego si consideramos que $k_y \rightarrow i\partial_y$ entonces el hamiltoniano (4.1) se escribe como:

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & i\partial_y + ik_x & 0 & 0 \\ i\partial_y - ik_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\partial_y - ik_x \\ 0 & 0 & -i\partial_y + ik_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{K'}^A \\ \psi_{K'}^B \\ \psi_K^A \\ \psi_K^B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_{K'}^A \\ \psi_{K'}^B \\ \psi_K^A \\ \psi_K^B \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

de (4.19) las ecuaciones para obtener ψ_K^A y ψ_K^B en el punto \mathbf{K} son

$$\begin{aligned} -i(\partial_y + k_x)\psi_K^B &= \tilde{\varepsilon}\psi_K^A \\ -i(\partial_y - k_x)\psi_K^A &= \tilde{\varepsilon}\psi_K^B \end{aligned} \quad (4.20)$$

desacoplando las ecuaciones

$$(-\partial_y^2 + k_x^2)\psi_K^\mu = \tilde{\varepsilon}^2\psi_K^\mu \quad (4.21)$$

con $\mu = A, B$. Las soluciones para ψ_K^A y ψ_K^B son

$$\psi_K^A(y) = Ae^{i\gamma_n y} + Be^{-i\gamma_n y}, \quad (4.22)$$

$$\psi_K^B(y) = Ce^{i\gamma_n y} + De^{-i\gamma_n y} \quad (4.23)$$

como en los bordes del nanoribbon existen átomos del tipo A y B , las funciones ϕ_K^A y ϕ_K^B definidas por (4.3) deben cumplir las condiciones

$$\phi^A(y=0) = \phi^B(y=0) = 0 \quad (4.24)$$

$$\phi^A(y=W) = \phi^B(y=W) = 0 \quad (4.25)$$

entonces tenemos

$$0 = e^{i\gamma_n x} \psi_K^A(y=0) + e^{i\gamma_n x} \psi_{K'}^A(y=0) \quad (4.26)$$

$$0 = e^{i\gamma_n x} \psi_K^B(y=0) + e^{i\gamma_n x} \psi_{K'}^B(y=0) \quad (4.27)$$

$$0 = e^{iKW} e^{i\gamma_n x} \psi_K^A(y=W) + e^{-iKW} e^{i\gamma_n x} \psi_{K'}^A(y=W) \quad (4.28)$$

$$0 = e^{iKW} e^{i\gamma_n x} \psi_K^B(y=W) + e^{-iKW} e^{i\gamma_n x} \psi_{K'}^B(y=W) \quad (4.29)$$

estas condiciones se verifican si

$$\psi_K^\mu(y=0) + \psi_{K'}^\mu(y=0) = 0 \quad (4.30)$$

$$e^{iKW} \psi_K^\mu(y=W) + e^{-iKW} \psi_{K'}^\mu(y=W) = 0 \quad (4.31)$$

Reemplazando (4.22) y (4.23) en estas condiciones tenemos

$$A + B + C + D = 0 \quad (4.32)$$

$$Ae^{i(\gamma_n+K)W} + Be^{-i(\gamma_n-K)W} + Ce^{i(\gamma_n-K)W} + De^{-i(\gamma_n+K)W} = 0 \quad (4.33)$$

escogiendo $B = C = 0$, se tiene $A = -D$ y

$$\begin{aligned} A(e^{i(\gamma_n+K)W} - e^{-i(\gamma_n+K)W}) &= 0 \\ \sin[(\gamma_n + K)W] &= 0 \\ (\gamma_n + K)W &= n\pi \\ \gamma_n &= \frac{n\pi}{W} - K = \frac{n\pi}{W} - \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \end{aligned} \quad (4.34)$$

Reemplazando $\psi_K^A = Ae^{i\gamma_n y}$ en la Ec. (4.21), se encuentra

$$\partial_y \psi_K^A = i\gamma_n A e^{iy}, \quad \partial_y^2 \psi_K^A = (i\gamma_n)^2 A e^{iy} = -\gamma_n^2 \psi_K^A$$

$$\begin{aligned} (-(-\gamma_n^2) + k_x^2) \psi_K^A &= \tilde{\varepsilon}^2 \psi_K^A \\ \gamma_n^2 + k_x^2 &= \tilde{\varepsilon}^2 \end{aligned}$$

$$\tilde{\varepsilon} = \pm \sqrt{\gamma_n^2 + q_x^2} \quad (4.35)$$

dado que todas las soluciones de γ_n conducen a soluciones oscilatorias, se concluye que no existen estados de borde localizados.

4.2.1. Método del *tight-binding*

Describimos la dispersión de energía de nanoribbons de borde armchair usando el hamiltoniano *tight-binding* (2.3) dado para el grafeno, utilizando de acuerdo a la figura 27 las condiciones de frontera dadas en la ecuación (4.24) y (4.25) que establecen que las funciones de onda de las subredes A y B en los bordes del nanoribbons se anulan simultáneamente. Así mismo consideramos que cada cadena unidad representada por el rectángulo rojo en la figura 27 se repite periódicamente a lo largo del eje del nanoribbons (eje x), cada cadena unidad interactúa con las cadenas laterales y vecinas a la izquierda y derecha de modo que el hamiltoniano del nanoribbons N -agnr es representado por una matriz de dimensión $2N \times 2N$ expresada como:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & te^{ik_x a} & 0 & 0 & \dots \\ t & 0 & t & 0 & 0 & te^{-ik_x a} & 0 & \dots \\ 0 & t & 0 & t & 0 & 0 & te^{ik_x a} & \dots \\ 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ te^{-ik_x a} & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & \dots \\ 0 & te^{ik_x a} & 0 & 0 & t & 0 & t & \dots \\ 0 & 0 & te^{-ik_x a} & 0 & 0 & t & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

Los resultados de la estructura de bandas obtenidas por diagonalizar el hamiltoniano (4.36) se presentan en las figuras 28 y 29 para diferentes anchos del nanoribbons. La figura 28 corresponde a nanoribbons N -agnr, donde el número entero N que representa el número de dímeros que constituyen la cadena unidad del nanoribbons verifica que

$$M = \frac{N+1}{3} \text{ es un número entero.} \quad (4.37)$$

Los resultados muestran que los nanoribbons N -agnr donde N verifica la condición (4.37) tienen comportamiento semimetálico con gap de energía cero, debido a que en las proximidades de $E = 0$ tenemos al menos un estado permitido, sin importar el ancho del nanoribbons.

Para los nanoribbons armchair N -agnr, en el cual el número de dímeros N no cumple con la condición (4.37) la estructura de bandas se muestra en la figura 29, resultados en los cuales se observa que existe un gap de energía $\Delta E \neq 0$ sin importar el ancho de los nanoribbons, por tanto dichos nanoribbons tienen comportamiento semiconductor.

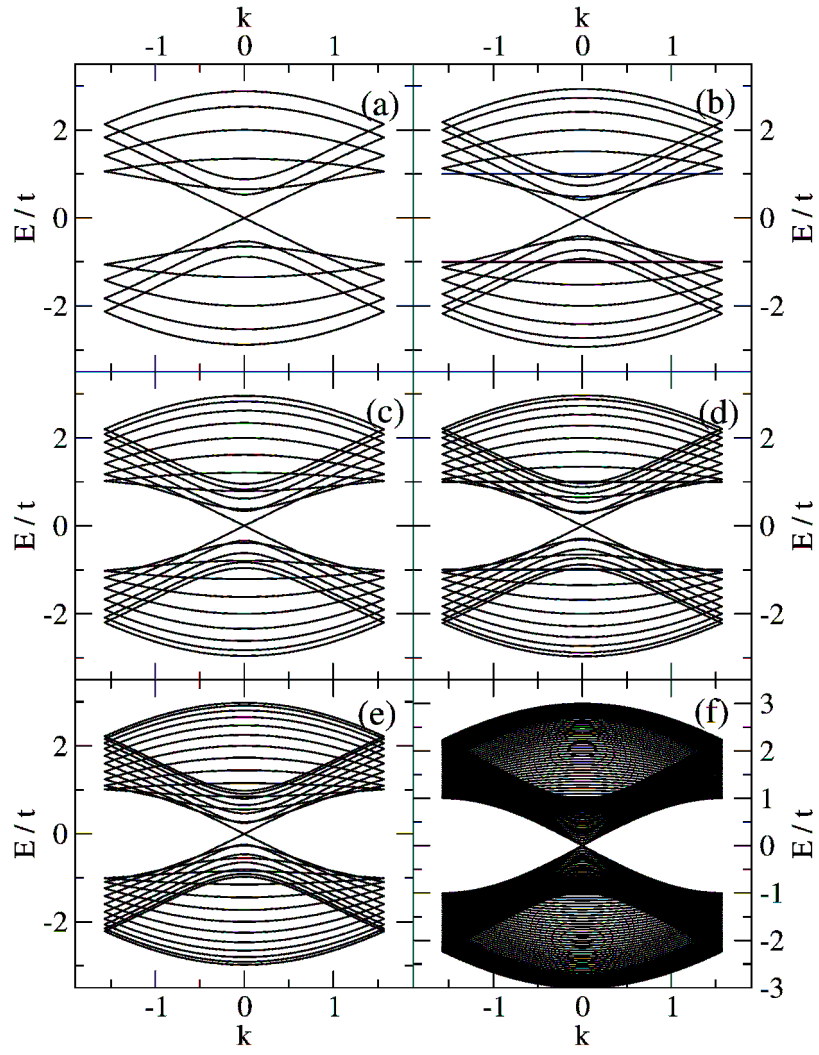


Figura 28: Espectro de energía de nanoribbons armchair cuyo ancho es formado por diferente cantidad de átomos (a) 8-agnr, (b) 11-agnr, (c) 14-agnr, (d) 17-agnr, (e) 20-agnr y (f) 98-agnr.

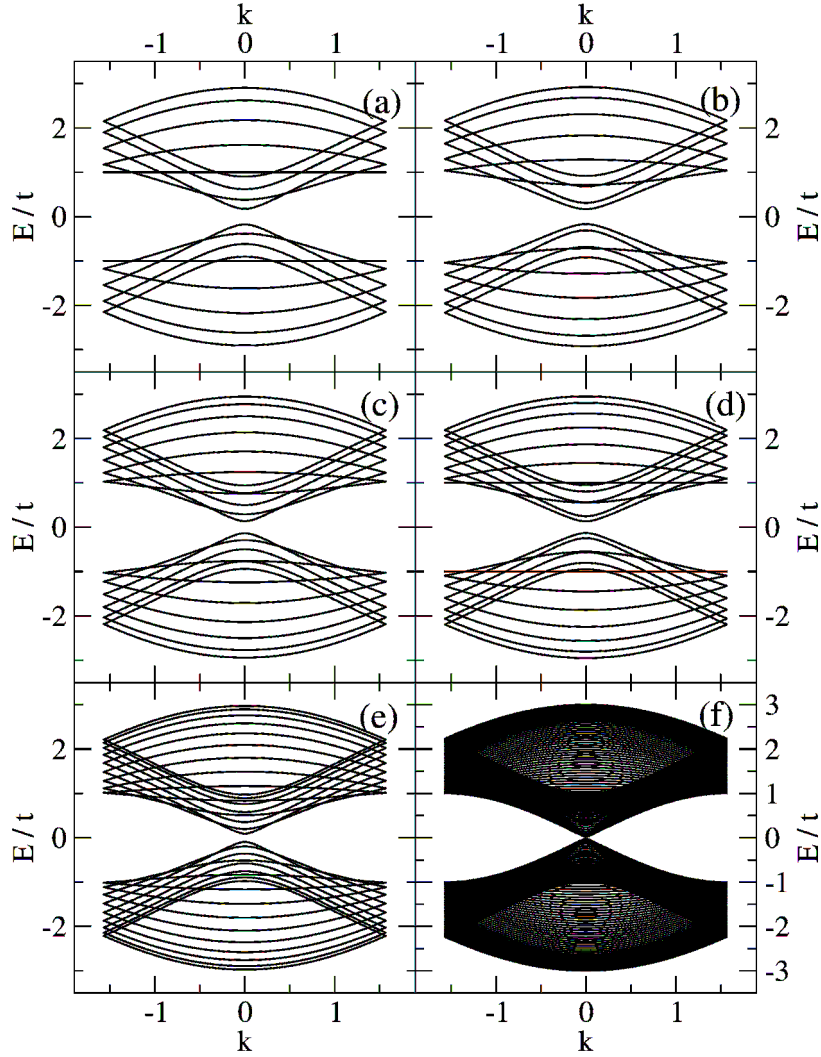


Figura 29: Espectro de energía de nanoribbons armchair cuyo ancho es formado por diferente cantidad de átomos (a) 9-agnr, (b) 10-agnr, (c) 12-agnr, (d) 13-agnr, (e) 18-agnr y (f) 100-agnr.

4.3. Nanoribbons barbados (bearded)

Para los nanoribbons de borde bearded mostrado en la figura 25 en $y = 0$ y $y = W$, donde $W = (3N - 1)a/2$, donde N es el número de dímeros que consituyen la cadena unidad, encontramos que el hamiltoniano *tight-binding* se expresa por una matriz $2N \times 2N$ obtenida de manera similar a la ecuación (4.18) como:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ t & 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & t & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & t & 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 2t \cos(k_x a) & 0 & t & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

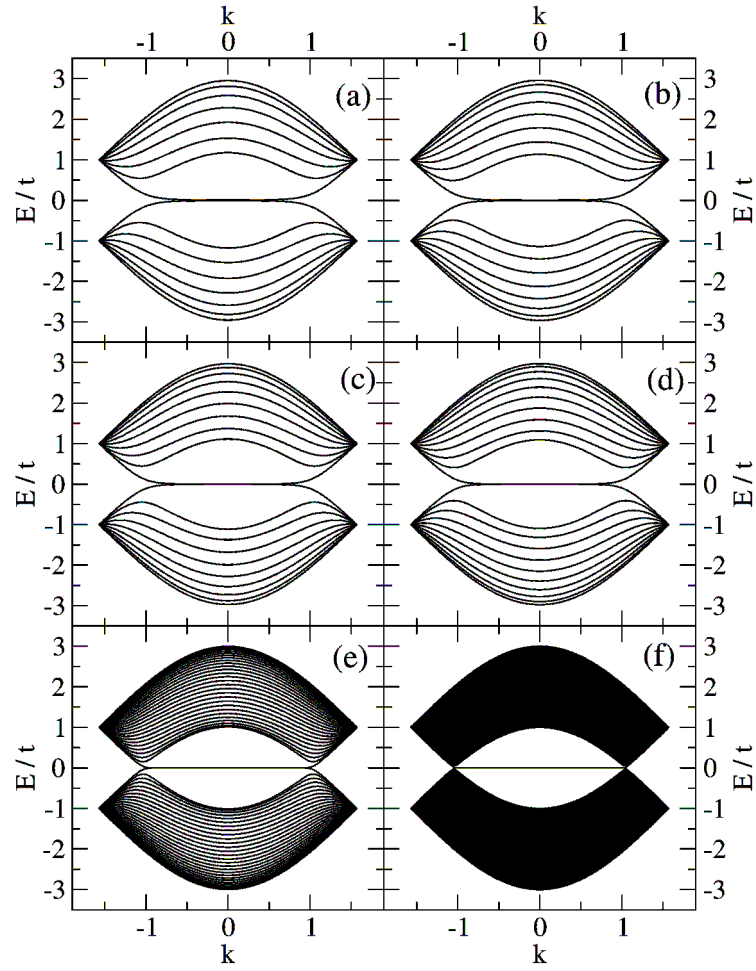


Figura 30: Espectro de energía de nanoribbons de borde zigzag-bearded con diferente número de átomos por celda unidad (a) 8-bearded, (b) 9-bearded, (c) 10-bearded, (d) 11-bearded, (e) 30-bearded y (f) 100-bearded

La estructura de bandas de nanoribbons de borde beard obtenidos al diagonalizar el hamiltoniano (4.38) se presenta en la figura 30 para diferentes anchos del nanoribbons, los resultados muestran que el espectro de energía es equivalente a los nanoribbons de borde zigzag, pero difieren su comportamiento para energías próximas a $E = 0$.

4.4. Nanoribbons zigzag-bearded

Calculamos el espectro de energía correspondiente a nanoribbons con borde zigzag en $y = W$, y borde barbado (bearded) en $y = 0$, representamos por N -zgbearded, de modo que el número de átomos que constituyen el ancho $W = 3Na/2$ del nanoribbons es $2N + 1$.

La figura 31 representa el espectro de energía para nanoribbons N -zgbearded, de diferentes anchos, obtenidas al diagonalizar el hamiltoniano (4.18) de dimensión $(2N + 1) \times (2N + 1)$. Los resultados encontrados muestran que estos nanoribbons presentan un gap de energía $\Delta E \neq 0$ al rededor de $E = 0$ para cualquier ancho, es decir, los nanoribbons de borde mixto zigzag-bearded tienen comportamiento semiconductor.

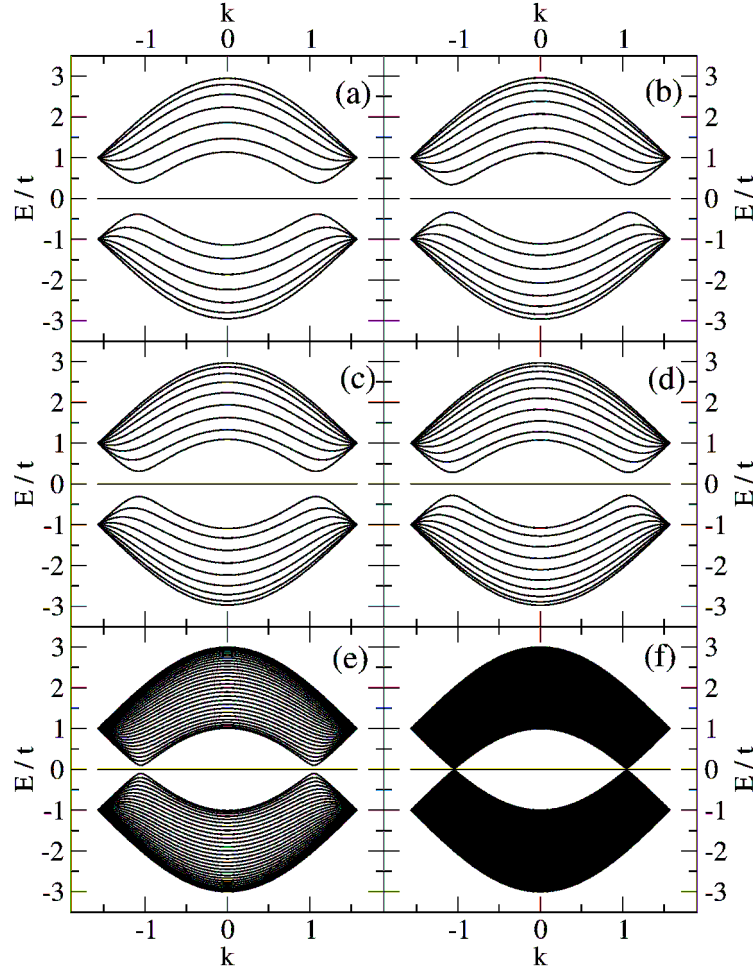


Figura 31: Espectro de energía de nanoribbons de borde zigzag-bearded con diferente número de átomos por celda unidad (a) 7-zgbearded, (b) 8-zgbearded, (c) 9-zgbearded, (d) 10-zgbearded, (e) 30-zgbearded y (f) 100-zgbearded

4.5. Conductancia eléctrica

De acuerdo a los espectros de energía observados en las figuras 26, 28, 29, 30 y 31 los nanoribbons de grafeno presentan cuantización de estados permitidos [64], esta cuantización trasladada a la conductancia eléctrica produce la cuantización de la conductancia eléctrica que depende directamente del ancho del nanoribbons. Para el cálculo de la conductancia eléctrica utilizamos la formula de Landauer (3.1) y las funciones de Green fuera de equilibrio [65]. A continuación presentamos resultados de conductancia eléctrica que afirman la naturaleza conductora o semiconductora de los

nanoribbons predicha por el espectro de energía.

En la figura 32 mostramos los resultados obtenidos para la conductancia eléctrica, la densidad de estados y el espectro de energía de nanoribbons con borde zigzag, siendo la figura 32-(a) correspondiente a un nanoribbons 8-zgnr de ancho $W = 11a$, donde para energías $-0.48t < E < 0.48t$ tenemos $T(E) = 1$, lo cual implica que para este rango de energía existe un solo canal φ_n de transmisión permitido, esto se corrobora con el hecho de que para este rango de energía en el espectro de energía existe un solo valor de k permitido, en cambio para el rango de energía $0.48t < E < 0.76t$ tenemos $T(E) = 3$, que indica que, en este rango de energía existen tres canales φ_n permitidos correspondientes a tres valores de k permitidos. El valor máximo del coeficiente de transmisión para el nanoribbons 8-zgnr es $T(E) = 8$, que ocurre en los rangos de energía $1.0t < E < 1.1t$ y $-1.1t < E < -1.0t$, asimismo en las energías $E = \pm 0.48t, \pm 0.76t, \pm 0.93t, \dots, \pm 2.62t, \pm 2.83t, \pm 2.95t$ se observa una alta concentración de estados permitidos, que generan discontinuidades en la densidad de estados conocidos como discontinuidades de Van-Hove, y permiten el salto de $T(E)$ en números enteros entre 0 y 8, ocurriendo el valor 0 para $|E| > 2.95t$. Así mismo en la figura 32-(b) para el nanoribbons 12-zgnr de ancho $W = 17a$ en el rango de energía $-0.34t < E < 0.34t$ tenemos $T(E) = 1$, es decir un canal de transmisión, los valores permitidos para $T(E)$ en este caso van de 0 a 12, ocurriendo el valor 0 para $|E| > 2.98t$ y el valor máximo 12 en los rangos de energía $-1.05t < E < -1.00t$ y $1.00t < E < 1.05t$. La naturaleza conductora de los nanoribbons con borde zigzag se debe al hecho de que para valores de energía próximas a $E = 0$ independiente del ancho del nanoribbons tenemos $T(E) = 1$, es decir $T(E)$ es diferente de cero.

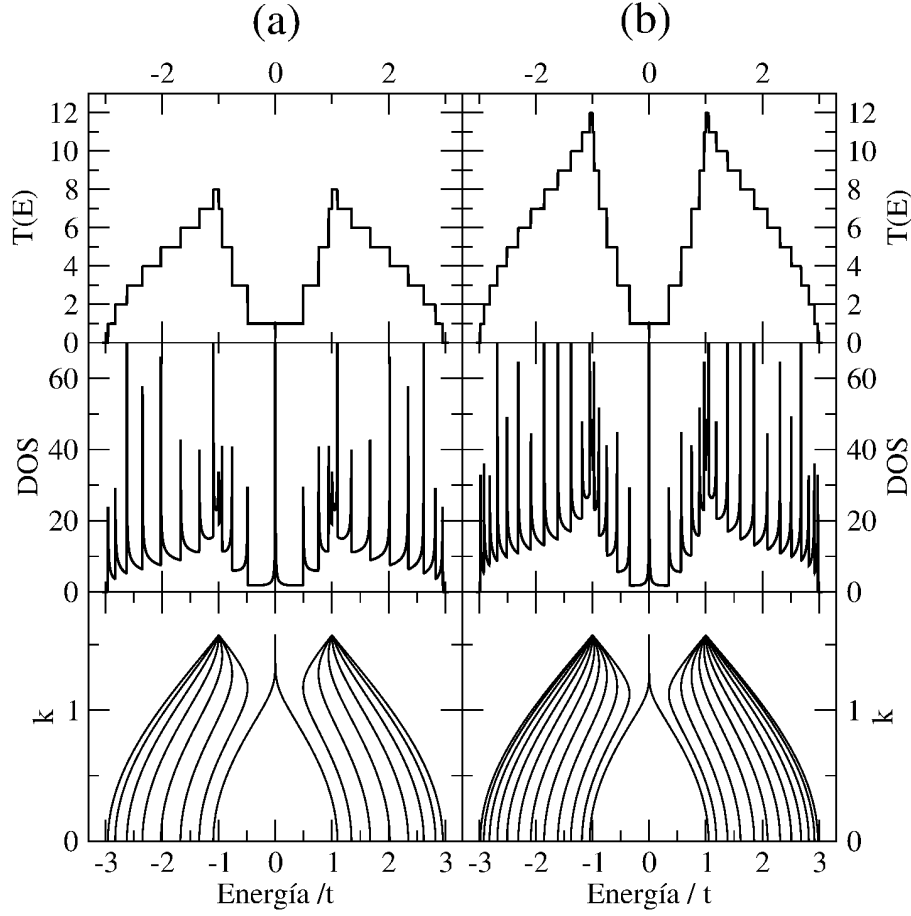


Figura 32: Conductancia, DOS y bandas de energía para (a) 8-zgnr y (b) 12-zgnr.

Los coeficientes de transmisión obtenidos usando la fórmula de Landauer, la densidad de estados y el espectro de energía de un nanoribbons de borde armchair 11-agnr de ancho $W = 10\sqrt{3}a$ se presentan en la figura 33, donde observamos que para energías $-0.41t < E < 0.41t$ existe un solo canal φ_n permitido, ello debido a que $T(E) = 1$ y que en el espectro de energía k tiene un solo valor permitido. Para el rango de energía $0.41t < E < 0.48t$ existen dos canales φ_n permitidos, debido a que $T(E) = 2$ y k tiene en este rango de energías dos valores permitidos, el valor máximo del coeficiente de transmisión es $T(E) = 5$ que ocurre en el rango de energías $-1.52t < E < -0.93t$ y $0.93t < E < 1.52t$. Las discontinuidades de van-Hove que permiten el salto de $T(E)$ en números enteros se presentan en las energías $E = \pm 0.41t; \pm 0.48t; \pm 0.72t; \pm 0.93t; \pm 1.00t; \dots; \pm 2.93t$. En la figura 33-b mostramos el coeficiente de transmisión, DOS y el espectro de energía correspondiente a un nanoribbons 14-agnr, que presenta propiedades similares al nanoribbons 11-agnr, con

la diferencia que los valores permitidos de $T(E)$ varían de 0 a 7.

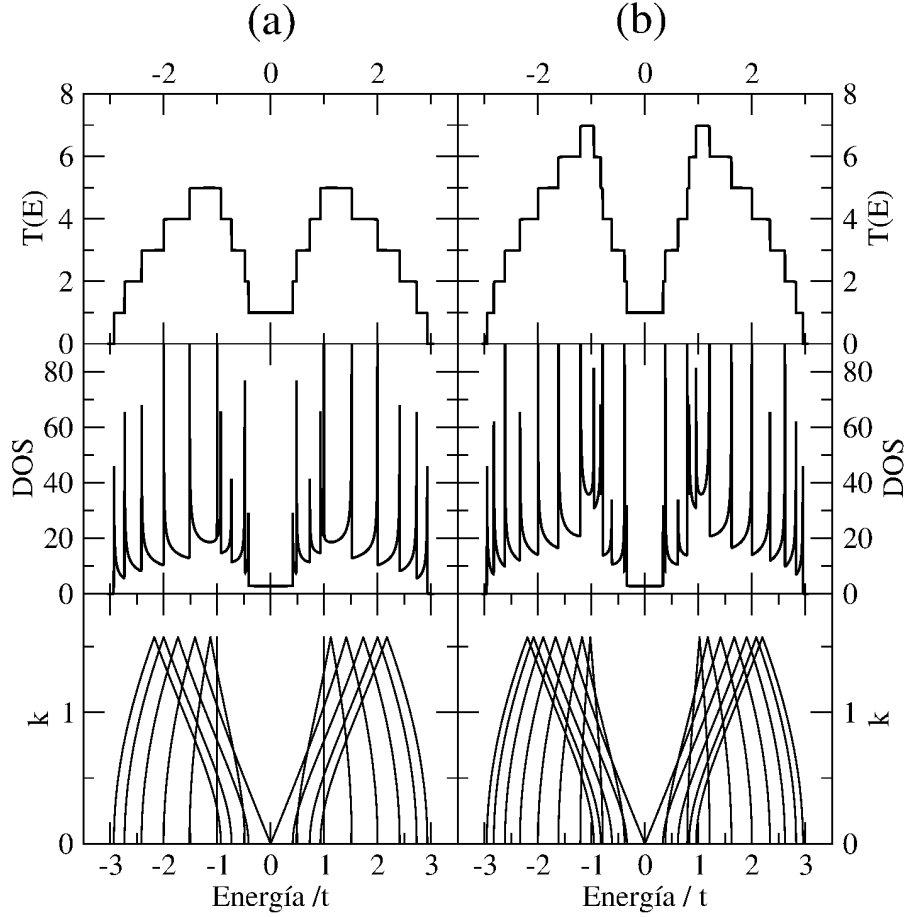


Figura 33: Conductancia, DOS y bandas de energía para (a) 11-agnr y (b) 14-agnr.

Los resultados del coeficiente de transmisión y densidad de estados mostrados en la figura 33 verifican la naturaleza semimetálica de los nanoribbons armchair, cuyos anchos verifican la condición (4.37) debido a que en las proximidades de $E = 0$ el coeficiente de transmisión es diferente de cero, es decir $T(E) = 1$ independientemente del ancho del nanoribbons.

El coeficiente de transmisión, DOS y el espectro de energía de un nanoribbons de borde armchair 12-agnr de ancho $W = 11\sqrt{3}a/2$ se presentan en la figura 34-a, donde observamos que en el rango de energías $-0.13t < E < 0.13t$ tenemos $T(E) = 0$, en el rango de energías $0.13t < E < 0.30t$ tenemos $T(E) = 1$, asimismo los valores de $T(E)$

son enteros que varían de 0 a 6. La figura 34-b muestra el coeficiente de transmisión, DOS y el espectro de energía de un nanoribbons 15-agnr, donde $T(E)$ varía de 0 a 7.

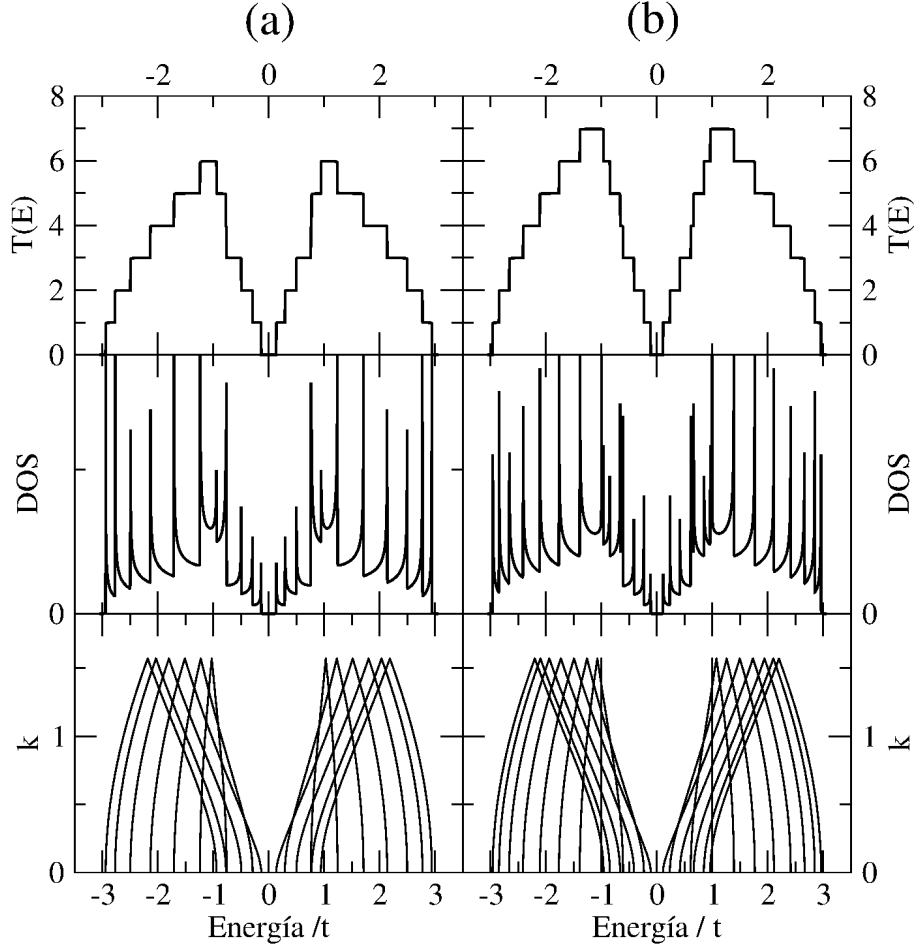


Figura 34: Conductancia, DOS y bandas de energía para (a) 12-agnr y (b) 15-agnr.

El ancho de los nanoribbons armchair utilizados en la figura 34 no cumplen con la condición 4.37, estos nanoribbons tienen comportamiento semiconductor, debido a que $T(E) = 0$ en las proximidades de $E = 0$, es decir existe un pequeño gap de energía $\Delta E \neq 0$. entre la banda de conducción y valencia. El gap de energía ΔE tiene una dependencia inversa con el ancho del nanoribbons, es decir a mayor ancho del nanoribbons el gap de energía disminuye.

Para los nanoribbons barbados 8-bearded de ancho $W = \frac{23}{2}a$ los resultados del coeficiente de transmisión, DOS y el espectro de energía se muestran en la figura 35-a,

observandose que en el rango de energías $-0.54t < E < 0.54t$ tenemos $T(E) = 1$, en el rango de energías $0.54t < E < 0.82t$ tenemos $T(E) = 3$, así mismo los valores de $T(E)$ varían de 0 a 7, ocurriendo el valor máximo en el rango de energías $0.98t < E < 1.18t$.

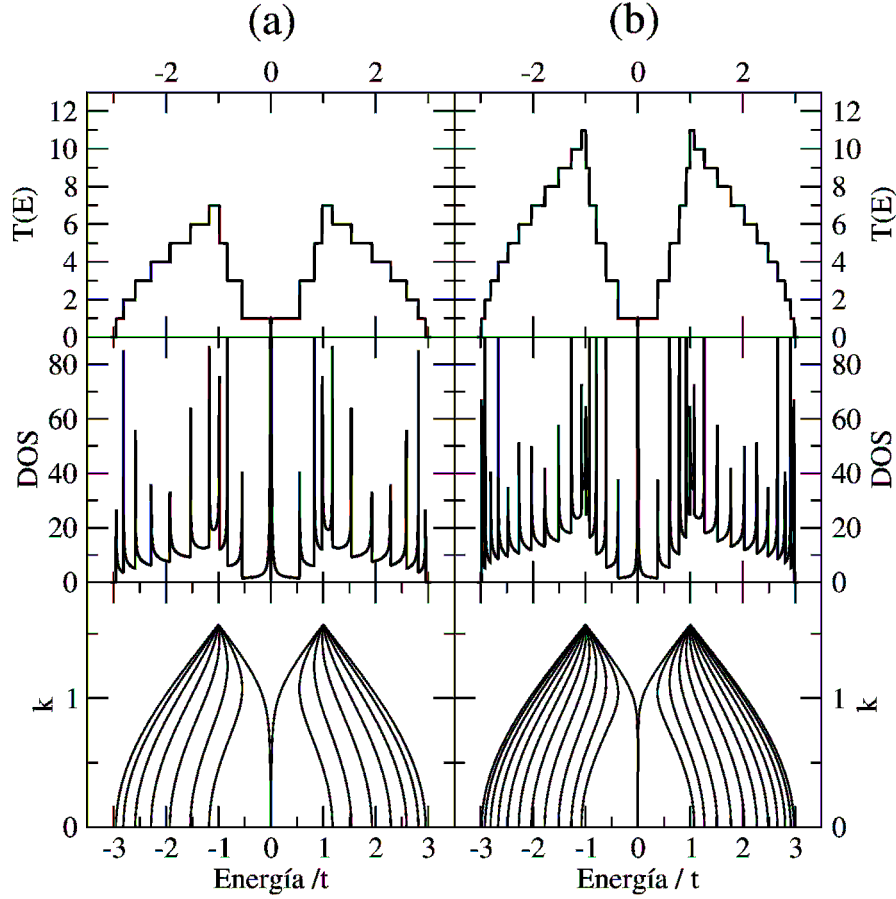


Figura 35: Conductancia, DOS y bandas de energía para (a) 8-bearded y (b) 12-bearded.

Los resultados del coeficiente de transmisión, la DOS y el espectro de energía calculados para el nanoribbon de borde mixto zigzag-bearded 8-zgbearded de ancho $W = 12a$ se presentan en la figura 36-a, donde se observa que en el rango de energía $-0.38t < E < 0.38t$ tenemos $T(E) = 0$, existiendo por tanto un gap de energía $\Delta E = 0.76t$ entre la banda de conducción y valencia. En la figura 36-b para el nanoribbons 12-zgbearded encontramos que en el rango de energía $-0.28t < E < 0.28t$ tenemos $T(E) = 0$, así mismo se encuentra que $T(E)$ varía entre 0 y 10, siendo el gap de energía entre banda de conducción y valencia $\Delta E = 0.56t$. Estos resultados corroboran

el hecho de que estos nanoribbons tienen comportamiento semiconductor, donde el gap de energía tiene una relación inversa con el ancho del nanoribbons.

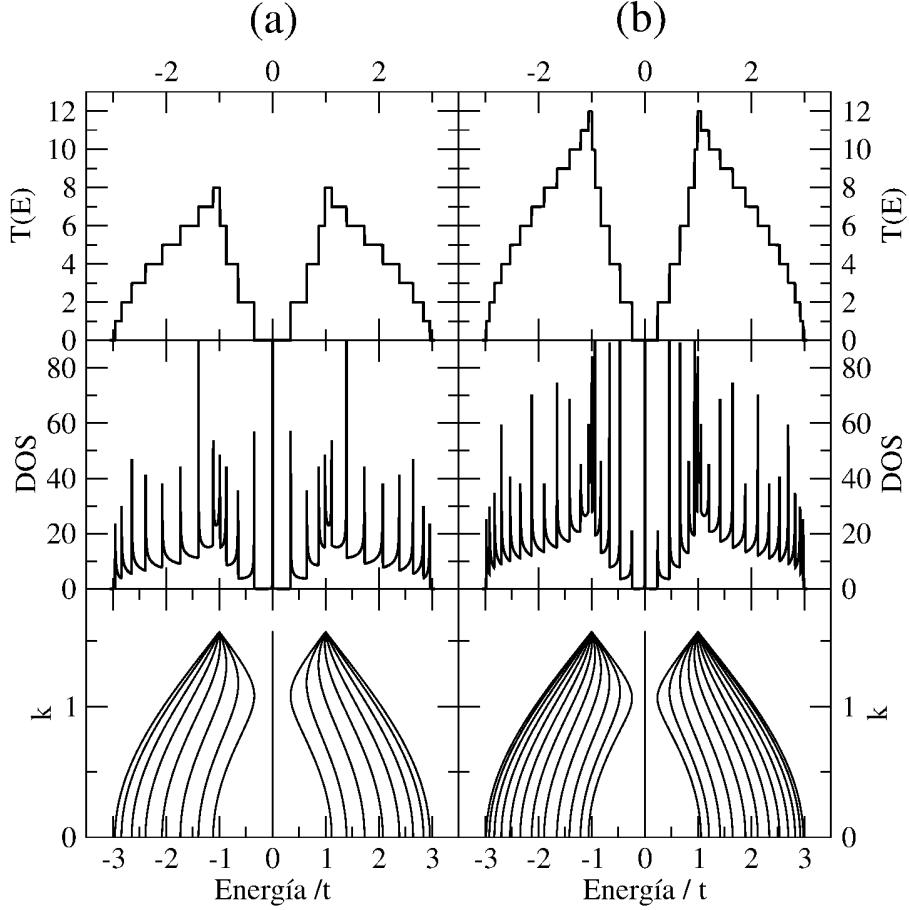


Figura 36: Conductancia, DOS y bandas de energía para (a) 8-zgbearded y (b) 12-zgbearded.

4.6. Nanoribbons en campo magnético

En esta sección describimos el espectro de energía de nanoribbons de grafeno de diferentes bordes bajo el efecto de un campo magnético uniforme \mathbf{B} perpendicular al plano del nanoribbons, cuyo efecto es introducido en la integral de Hopping t_{ij} por medio de la sustitución de Pierls [26]

$$t_{ij} \rightarrow t_{ij} e^{i2\pi\alpha_{ij}}, \quad (4.39)$$

donde α_{ij} es el flujo magnético Φ por unidad de flujo cuántico $\Phi_0 = h/e$ dado por

$$\alpha_{ij} = \frac{e}{h} \int_i^j d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}. \quad (4.40)$$

Para un nanoribbons de borde zigzag N -zgnr la sustitución de Pierls (4.39) produce en los elementos de matriz $2t \cos(k_x a)$ de la ecuación (4.18) un cambio de fase de $2\pi m\alpha$ con m números enteros que van de 1 a N , es decir

$$2t \cos(k_x a) \rightarrow 2t \cos(k_x a + 2\pi m\alpha), \quad (4.41)$$

donde

$$\alpha = \frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{B_0 S_{hex}}{\Phi_0},$$

siendo $S_{hex} = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2$ es el área de la celda unitaria de cada sub red del grafeno y B_0 la intensidad del campo magnético aplicado.

El espectro de energía de un nanoribbon 20-zgnr bajo la acción del campo magnético uniforme se muestra en la figura 37 para diferentes valores de $\alpha = \Phi/\Phi_0$ (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 1/500$, (c) $\alpha = 1/250$, (d) $\alpha = 1/100$, (e) $\alpha = 1/50$, (f) $\alpha = 1/20$, (g) $\alpha = 1/10$, (h) $\alpha = 1/4$ y (i) $\alpha = 1/2$, encontrándose que para pequeños campos magnéticos ($\alpha = 1/500$) el espectro de energía sufre ligeras variaciones respecto al espectro de energía para $\alpha = 0$, debido a que el movimiento ciclotrónico del electrón es interrumpido por el borde del nanoribbons, a medida que se incrementa la intensidad del campo magnético el movimiento ciclotrónico se encuentra mas definida, para $\alpha = 1/50$ el radio ciclotrónico es comprable con el ancho del nanoribbons. En cambio si el campo magnético es extremadamente alto $\alpha = 1/4$ la estructura de bandas muestra que los niveles de Landau constituyen sub bandas de Landau.

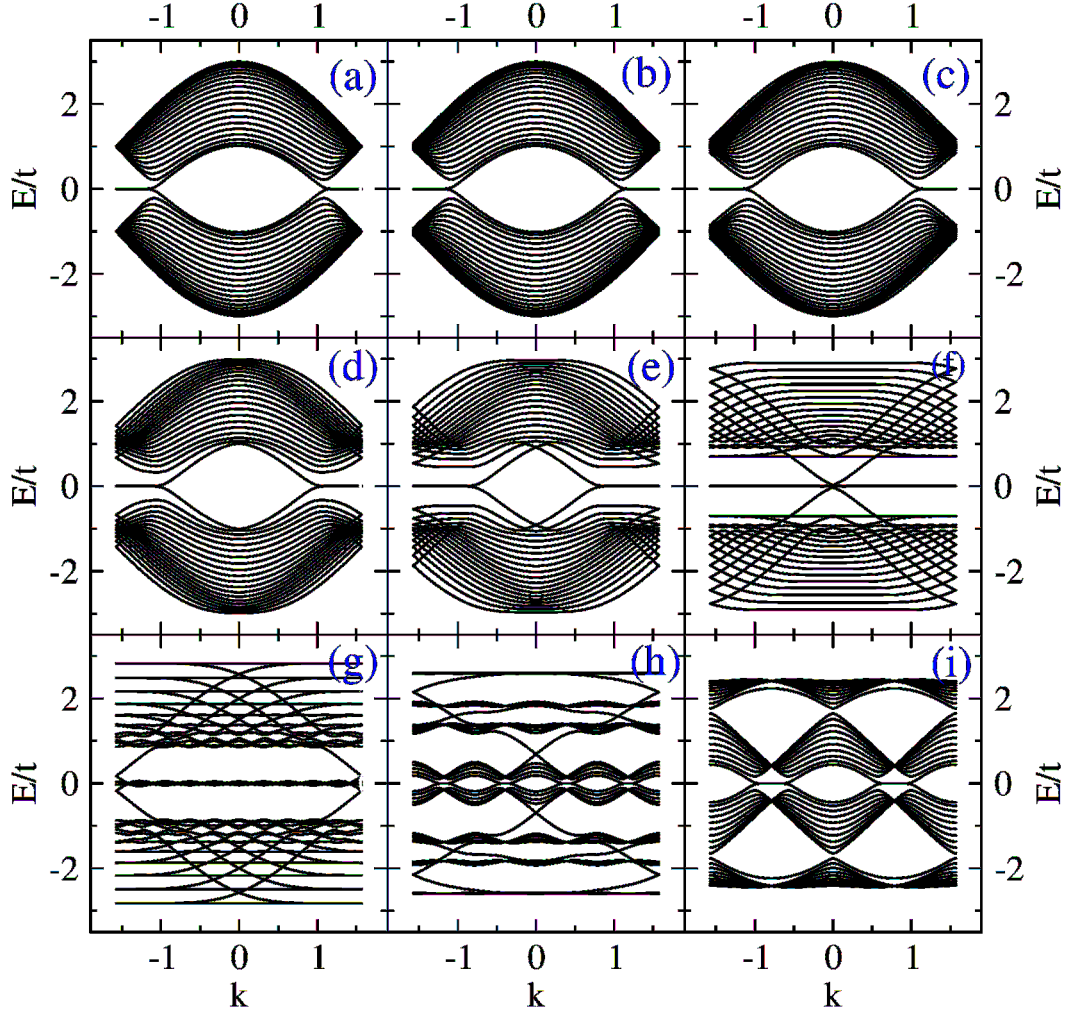


Figura 37: Estructura de bandas de energía de un nanoribbons 20-zgnr (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 1/500$, (c) $\alpha = 1/250$, (d) $\alpha = 1/100$, (e) $\alpha = 1/50$, (f) $\alpha = 1/20$, (g) $\alpha = 1/10$, (h) $\alpha = 1/4$ y (i) $\alpha = 1/2$

Para los nanoribbons de borde armchair 20-agnr y 22-agnr, los espectros de energía para diferentes valores de campo magnético se presentan en las figuras 38 y 39 respectivamente, donde similarmente a los nanoribbons 20-zgnr se observa que para pequeños campos magnéticos $\alpha = 1/500$ los espectros de energía son casi invariantes respecto al espectro sin campo magnético $\alpha = 0$, resultado por tanto que los movimientos ciclotrónicos de las cargas eléctricas son interrumpidas por los bordes del nanoribbons, por tanto los niveles de Landau no se encuentran bien definidas, para campos magnéticos muy altos encontramos también que los niveles de Landau se

convierten en subbandas de Landau.

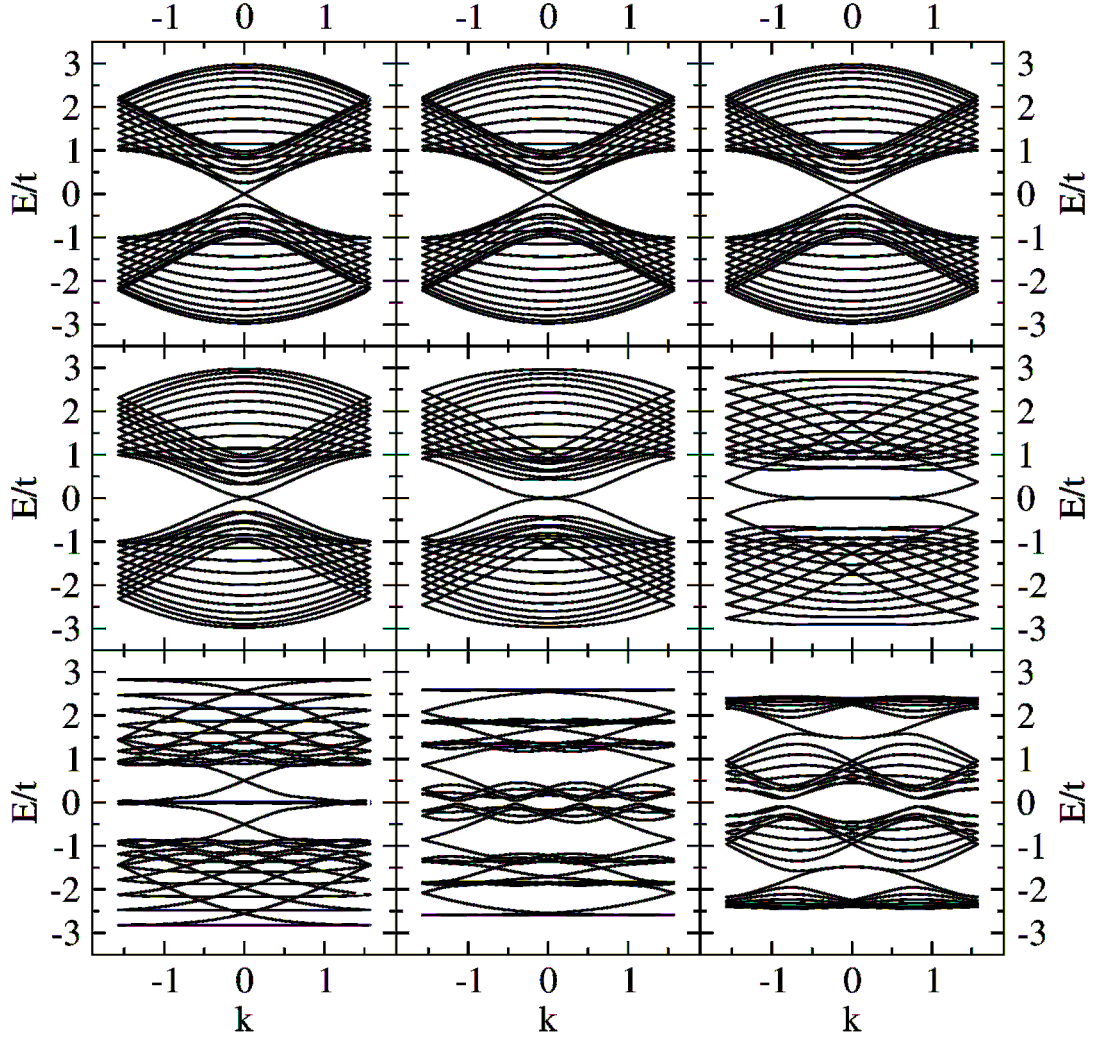


Figura 38: Estructura de bandas de energía de un nanoribbons 20-átnr (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 1/500$, (c) $\alpha = 1/250$, (d) $\alpha = 1/100$, (e) $\alpha = 1/50$, (f) $\alpha = 1/20$, (g) $\alpha = 1/10$, (h) $\alpha = 1/4$ y (i) $\alpha = 1/2$

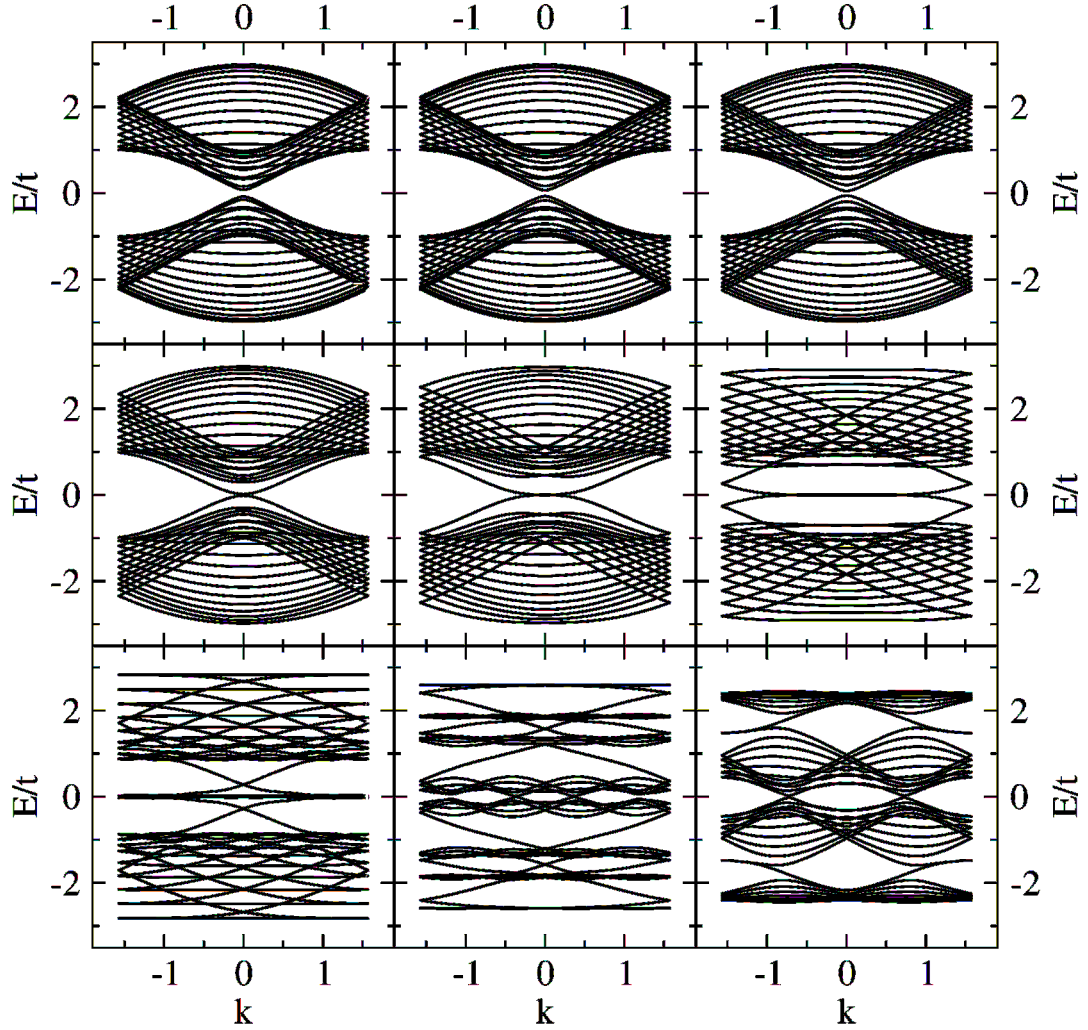


Figura 39: Estructura de bandas de energía de un nanoribbons 22-átnr (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 1/500$, (c) $\alpha = 1/250$, (d) $\alpha = 1/100$, (e) $\alpha = 1/50$, (f) $\alpha = 1/20$, (g) $\alpha = 1/10$, (h) $\alpha = 1/4$ y (i) $\alpha = 1/2$

Cuando el campo magnético uniforme actúa sobre nanoribbons de borde bearded y bordes mixtos zigzag-bearded los espectros de energía para diferentes intensidades del campo magnético se presentan en las figuras 40 y 41 respectivamente. Los resultados muestran nuevamente que para pequeños campos magnéticos los movimientos ciclotrónicos de las cargas eléctricas se encuentran interrumpidas por los bordes de los nanoribbons, y para campos magnéticos extremadamente altos $\alpha = 1/4$ los Niveles de Landau constituyen subbandas de Landau.

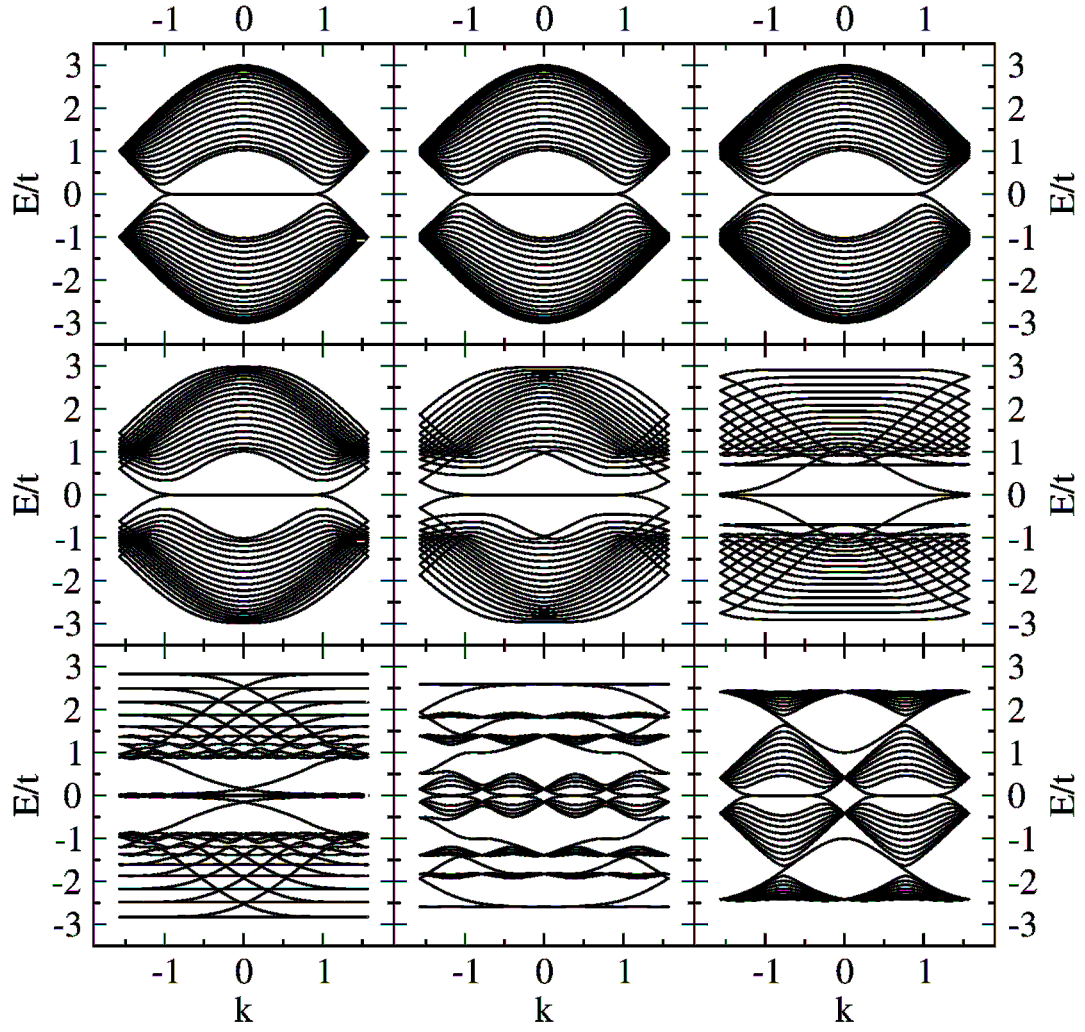


Figura 40: Estructura de bandas de energía de un nanoribbons 20-bearded (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 1/500$, (c) $\alpha = 1/250$, (d) $\alpha = 1/100$, (e) $\alpha = 1/50$, (f) $\alpha = 1/20$, (g) $\alpha = 1/10$, (h) $\alpha = 1/4$ y (i) $\alpha = 1/2$

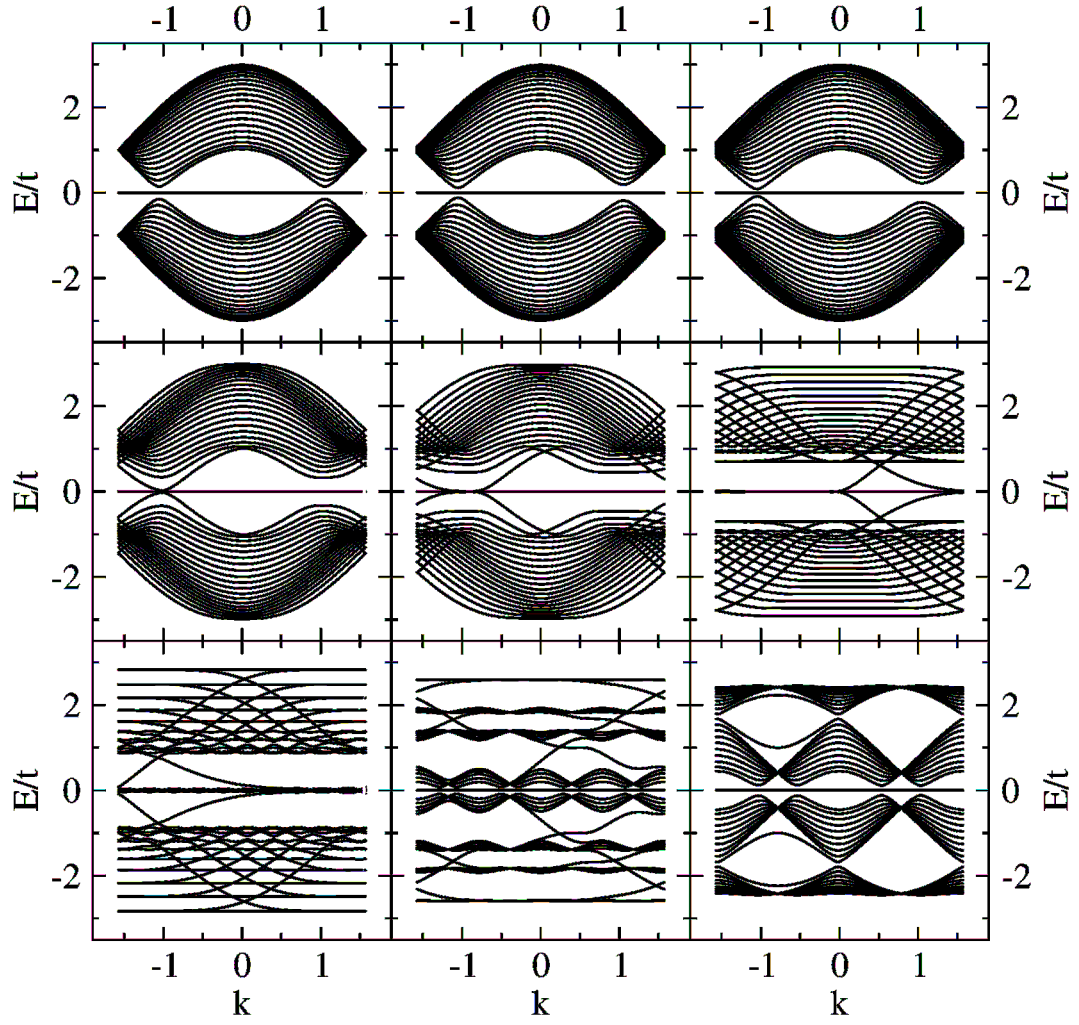


Figura 41: Estructura de bandas de energía de un nanoribbons 20-zgbearded (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 1/500$, (c) $\alpha = 1/250$, (d) $\alpha = 1/100$, (e) $\alpha = 1/50$, (f) $\alpha = 1/20$, (g) $\alpha = 1/10$, (h) $\alpha = 1/4$ y (i) $\alpha = 1/2$

Capítulo 5

Nanoporos

Los nanoporos son agujeros de tamaño nanométrico en materiales biológicos o de estado sólido que permiten transportar a través de él iones y moléculas, son dispositivos que han generado recientemente intensa actividad de investigación teórica y experimental en la comunidad científica. Los nanoporos se presentan en la actualidad como dispositivos muy prometedores para la exploración del genoma, en particular en la secuenciación del ADN [66,67]. Se encuentra también que el principal inconveniente para utilizar nanoporos tanto en estado sólido o biológicos es la longitud (largo) es 10 a 100 veces mayor que la distancia entre dos bases de una molécula de ADN (ver figura 42-a,b,c), esto hace que la lectura de los cambios de corriente eléctrica detectados por el nanoporo correspondan a un conjunto de moléculas de ADN y no así a una sola molécula, esta dificultad se salva si se utilizan nanoporos bidimensionales ultra delgados como es el caso de nanoporos de grafeno (ver figura 42-d), que debido a su espesor de un átomo permiten observar cambios característicos en la conductancia eléctrica producidos por el paso de una sola molécula a través del nanoporo. Para obtener los nanoporos de grafeno se colocan hojas de grafeno en agujeros de nitruro de silicio y se perfora el agujero de tamaño nanométrico en el grafeno utilizando un haz de electrones de un microscopio electrónico de transmisión [68]. Otra de las características que hacen interesante a los nanoporos de grafeno es que son materiales altamente conductores

En los últimos años los nanoporos se han presentado como herramientas poderosas para el análisis de moléculas individuales, ellos han sido utilizados para caracterizar rápida y eficientemente biopolímeros de ADN usando nanoporos de estado sólido [69,70], se examinaron también el efecto local de proteínas a lo largo de la longitud

del ADN, usando el hecho de que el transporte de corriente a través el ADN, así como del ADN con proteínas a lo largo de su longitud son distintas [71]. Estos y otros resultados experimentales son un paso crucial para la exploración del genoma, y permiten visualizar la viabilidad de la lectura de la información a lo largo del ADN a alta resolución con un nanoporo de estado sólido es posible.

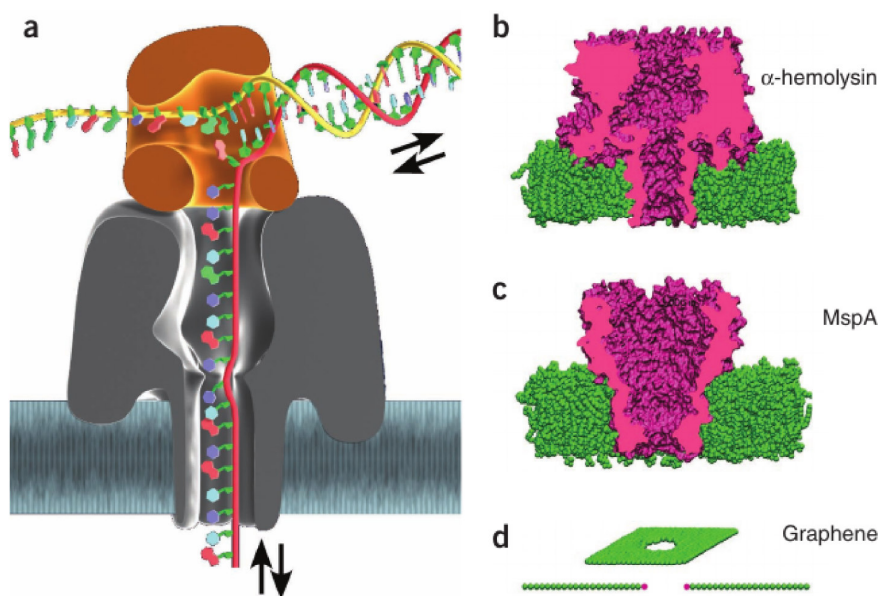


Figura 42: Nanoporos para la secuenciación del ADN. (a) el ADN se inserta en un nanoporo, con control de velocidad proporcionado por una ADN polimerasa $\Phi 29$ (marrón). Un nanoporo α -hemolisina (gris) está incrustado en una bicapa de lípidos. El sustrato de ADN (columna vertebral rojo) se inserta en el poro por un campo eléctrico aplicado. Su movimiento dentro o fuera del poro (flechas) puede ser controlado por el campo eléctrico aplicado y la actividad de la polimerasa. (b) Estructura de un nanoporo α -hemolisina insertado en una bicapa lipídica. (c) Estructura de un nanoporo MspA insertado en una bicapa lipídica. (d) Un nanoporo grafeno dibujado en la misma escala que la α -hemolisina y poros proteicos MspA [72].

En la actualidad encontramos también intensa actividad científica en el transporte electrónico de sistemas moleculares principalmente en el caso del ADN, por su importancia médica y la posibilidad de construir nuevos dispositivos que utilicen sistemas híbridos de ADN con materiales de estado sólido, debido a que los resultados encontrados muestran que las moléculas de ADN tienen características

semiconductoras, que depende del segmento de ADN y en particular de la secuencia de las moléculas de ADN [73–76]. Estos resultados permiten también entender que la utilización de nanoporos de grafeno es perfectamente posible para la lectura directa de diversos tipos de moléculas por ser el grafeno un material conductor por excelencia [77]. Los cambios que generan cada tipo de las secuencia nitrogenada de ADN, conocidos también como nucleótidos, que son la adenina, guanina, citosina y timina producen al pasar por los nanoporos un cambio característico en la conductancia eléctrica del nanoporo, cualidad que permitirá en el futuro realizar una lectura rápida y eficaz de secuencias completas del ADN.

Nuestra idea en el presente capítulo es analizar numéricamente dentro del modelo del *tight-binding* y el régimen de transporte balístico los cambios que producen diversos tipos de moléculas en los perfiles de conductancia eléctrica de nanoporos construidos en redes cuadradas y el grafeno, la descripción del transporte electrónico se realiza usando la Formula de Landauer y las funciones de Green descritas en el capítulo 3. Los resultados se muestran en términos de la variación del coeficiente de transmisión, debido a que los cambios producidos en los perfiles del coeficiente de transmisión por la presencia de las moléculas son muy pequeñas.

5.1. Nanoporos en red cuadrada

El transporte de carga a través de nanodispositivos adheridos a dos electrodos metálicos semi-infinitos se describe en la sección 3.1, donde la Fórmula de Landauer establece que la conductancia eléctrica se encuentra cuantizada en múltiplos de la unidad cuántica de la conductancia $G_0 = e^2/h$.

En los últimos años, el transporte de carga a través de sistemas moleculares ha despertado el interés de diferentes grupos de investigación. Y obviamente las moléculas que despiertan mayor interés son los cuatro monómeros o nucleótidos del ácido desoxirribonucleico, ADN, que consisten de dos partes, la primera es un azúcar, desoxirribosa, con un grupo fosfato adherido, mientras que la segunda es una base que puede ser la adenina (A), guanina (G), citosina (C) o timina (T) [78]. El esqueleto del ADN está formado por dos cadenas que forman los azúcares unidos a través de los grupos fosfatos y las bases se colocan perpendiculares a las cadenas de modo que unen a las mismas pero sin repetir la base en el mismo lugar de las dos cadenas, las bases se unen como CG y AT, o GC y TA a través de dos pares ligados de hidrógeno [78].

Se han reportado estudios teóricos sobre el transporte de carga a través de algunas secuencias de ADN [73, 74] que pueden ser considerados desde el punto de vista de la física como nanohilos conectados a electrodos que en algunos estudios son nanoribbons de grafeno [75]. Los resultados sustentan que esas secuencias de ADN tienen un comportamiento semiconductor y muestran que la relación corriente-voltage de los segmentos depende de la longitud del nanohilo y en particular de la secuencia de los nucleótidos [75, 76].

Por otro lado, se ha sugerido que cuando un sistema conductor no son moléculas sino una red cristalina bidimensional como el grafeno con un nanoporo conectado a dos contactos metálicos semi-infinitos debe presentar una conductancia que podría sensar moléculas que atravesen el nanoporo de modo que la conductancia dependiese del tipo de molécula y la orientación de la misma al atravesar el nanoporo. De esa forma se podría identificar los nucleótidos del ADN sensando las bases que presentarían una señal particular y característica en la conductancia para cada base [77].

En la presente sección, hacemos un estudio bastante básico y fundamental de un nanoporo en un conductor rectangular adherido a dos contactos metálicos semi-infinitos donde el conductor y los contactos son emulados por una red cuadrada en la aproximación *tight-binding* a primeros vecinos. Sobre el nanoporo colocamos moléculas con orientaciones en el eje x e y y consideramos que las moléculas están débilmente acoplados al conductor.

5.1.1. Modelo

Un conductor adherido a dos contactos metálicos semi-infinitos con potenciales químicos determinados es un sistema abierto. Esto significa que los portadores de carga que proceden de izquierda a derecha con una energía igual al potencial químico del contacto izquierdo son esparcidos por las interfaces contacto izquierdo-conductor y conductor-contacto derecho, de modo que al alcanzar el contacto derecho, los portadores de carga no regresan hacia el contacto izquierdo. De la misma forma, los portadores de carga que proceden de derecha a izquierda -con una energía igual al potencial químico del contacto derecho-, sufren esparcimiento en las interfaces mencionadas y una vez alcanzado el contacto izquierdo no retornan más hacia el contacto derecho.

Considerando el punto de vista reduccionista, los contactos y el conductor pueden

ser emulados por redes rectangulares semi-infinitas de sítios *atómicos* en el primer caso y por una red rectangular finita de sítios *atómicos* en el segundo. Esto es posible porque, cuando un portador de carga se mueve en una dimensión el hamiltoniano está conformado por la energía cinética y la energía potencial que sufre el portador. Cuando se discretiza la energía cinética se genera una matrix tridiagonal y cuando se hace lo mismo con la energía potencial se obtiene una matriz diagonal. Los elementos no diagonales de la matriz de energía cinética está dado por

$$t = -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \quad (5.1)$$

donde m^* es la masa efectiva de los portadores de carga, a es el parámetro de red de la cadena lineal y \hbar la constante de Planck dividido entre 2π . Y los elementos diagonales de la matriz están dados por $U_j + 2t$, donde U_j es la energía potencial del punto de discretización j y a t se le denomina el término de acoplamiento entre los puntos que resultan de la discretización de un sistema unidimensional (1D) [46]. Esta matriz producida por la discretización por diferencias finitas del hamiltoniano de un flujo de portadores de carga a través de un conductor unidimensional es equivalente al hamiltoniano de una cadena unidimensional de sitios atómicos que se acoplan considerando orbitales atómicos tipo s a primeros vecinos en la aproximación de ligaciones fuertes (*tight-binding*) con un parámetro de *hopping* t [46].

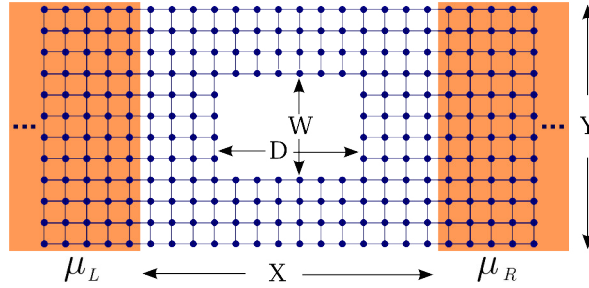


Figura 43: Representación esquemática de un nanoporo rectangular construido en una red rectangular finita conectado a dos electrodos semi-infinitos.

Por otro lado, para una red rectangular finita de sítios atómicos con orbitales tipo s y acoplamiento a primeros vecinos, el hamiltoniano en primera cuantización está definido como

$$H = \sum_{i,j} E_s + \sum_{i,j} t_x [|i,j\rangle\langle i+1,j| + |i+1,j\rangle\langle i,j|] + t_y [|i,j\rangle\langle i,j+1| + |i,j+1\rangle\langle i,j|] \quad (5.2)$$

donde t_x y t_y son los parámetros de *hopping* a lo largo del eje x e y , respectivamente, y los índices i, j indican las posiciones discretas de los sitios de la red dadas por $(x_i, y_j) = (ia_x, ja_y)$.

Un nanoporo es generado en la red rectangular finita considerando la energía de los sitios en esa región un valor totalmente diferente y mayor que la energía de los sitios de los contactos izquierdo y derecho, μ_L y μ_R , respectivamente y de la red rectangular $\mu_L - \mu_R$, como muestra el diagrama esquemático de la figura 43, donde el nanoporo de longitud D y ancho W es construido dentro de la red finita de longitud X y ancho Y , que está conectada a los electrodos izquierdo y derecho que se identifican con los potenciales químicos μ_L y μ_R , respectivamente, el electrodo izquierdo constituye la fuente de cargas eléctricas y el electrodo derecho el sumidero. El análisis del transporte de portadores se estudia dentro de la formulación de Landauer [79, 80] descrito en la sección 3.1, donde la conductancia eléctrica G se expresa en función del coeficiente de transmisión $T(E)$ como [45]

$$G(E) = \frac{2e^2}{h} T(E). \quad (5.3)$$

En este contexto, tenemos el primer proceso en que definimos la conductancia del sistema contacto izquierdo-conductor-contacto derecho; luego el segundo proceso en la que obtenemos la conductancia del sistema con un nanoporo incluido en el conductor y el tercer proceso, que involucra la presencia de moléculas en el centro del nanoporo y calculamos la conductancia del sistema.

Para simular el efecto de las moléculas -que se encuentran en el centro del nanoporo-, sobre la conductancia del sistema construimos un algoritmo que incluye el hamiltoniano de la molécula en el nanoporo considerando la interacción entre átomos de la propia molécula, así como la interacción entre la molécula con los sitios del borde que definen el nanoporo dentro de la aproximación *tight-binding*.

Funciones de Green

Para determinar los canales de transmisión en el dispositivo resolvemos la ecuación de autovalor del Hamiltoniano del sistema usando el método de las funciones de Green [46, 65]. Finalmente, la función de Green G_D del conductor con el nanoporo y las moléculas en el centro del nanoporo tal como se muestra en la figura 43 se obtiene como

$$G_D = \left[(E \pm i\eta)I - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R \right]^{-1} \quad (5.4)$$

donde I es la matriz identidad, H_D el hamiltoniano del conductor que incluye al nanoporo y a las moléculas que se incluyen en el centro del mismo, $\pm i\eta \rightarrow 0$ es un número imaginario pequeño que permite obtener las funciones de Green retrasadas (-) y avanzadas (+); asimismo $\Sigma_{L,R}$ son las auto-energías asociadas a los electrodos izquierdo y derecho, respectivamente, y que contienen toda la información acerca de los contactos semi-infinitos.

Para determinar las auto-energías de los contactos semi-infinitos usamos las ideas propuestas por Lee y Joannopoulos [60, 61] quienes consideran que los conductores semi-infinitos están formados por cadenas verticales finitas de sitios, $h_{l,r}$, que se acoplan a las cadenas verticales laterales y vecinas a izquierda y a derecha mediante una matriz diagonal, $V_{l,r}$, cuyos elementos incorporan las interacciones a primeros vecinos entre cada sitio de las cadenas verticales. Por tanto, las funciones de Green de los contactos izquierdo y derecho están dados por $g_l = V_l(1/h_l)V_l^\dagger$ y $g_r = V_r(1/h_r)V_r^\dagger$, respectivamente.

Luego las auto-energías de los contactos se determinan mediante $\Sigma_{L,R} = \Sigma_q$ siendo $\Sigma_q = H_{Dq}g_qH_{Dq}^\dagger$, siendo H_{Dq} la matriz de acoplamiento entre el conductor y el contacto q y $H_{Dq}^\dagger = H_{qD}$ la matriz de acoplamiento del contacto q con el dispositivo. Para el cálculo de $g_{L,R}$ utilizamos el método recursivo de convergencia rápida sugerida por Sancho *et al* [50, 51].

Finalmente, el coeficiente de transmisión es $T(E) = \text{Tr} \left[\Gamma_L G_D \Gamma_R G_D^\dagger \right]$ donde $\Gamma_{L,R}$ son las funciones de acoplamiento de los contactos con el dispositivo y se determinan mediante $\Gamma_{L,R} = i(\Sigma_{L,R} - \Sigma_{L,R}^\dagger)$.

A partir de la función de Green, G_D , obtenemos también, la densidad de estados

(DOS) que proporciona la cantidad de estados disponibles en un intervalo de energía,

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr} \left[\text{Im} \left[G_D(E) \right] \right]. \quad (5.5)$$

5.1.2. Resultados y discusión

En el presente trabajo simulamos el conductor como una red rectangular finita de sitios que poseen una periodicidad en las dos dimensiones de modo que los parámetros de red son $a_x = a_y$ considerando una interacción a primeros vecinos con una energía de acoplamiento $t_x = t_y$. Los contactos semi-infinitos conectados a ambos lados del conductor poseen la misma periodicidad espacial y la misma interacción energética a primeros vecinos. Debido a las reducidas dimensiones del sistema, los coeficientes de transmisión a través del conductor se cuantizan de forma tal como se observan en la figura 44.

La figura 44(a) muestra la evolución de la cuantización del coeficiente de transmisión con respecto a la energía y se puede apreciar que los valores del coeficiente de transmisión evolucionan desde 0 hasta 20. El valor 0 corresponde para los coeficientes de transmisión cuando la energía, $|E| > 4t_{x,y}$. Para estos valores de energía no existe transporte porque la energía de los portadores de carga son superiores o inferiores al ancho de la banda del sistema. Esto se corrobora observando la densidad de estados, DOS, cuyos resultados se muestran en la figura 44(b), observándose que para $|E| > 4t_{x,y}$ no existe presencia de estados permitidos que permitan el transporte de portadores de carga.

El coeficiente de transmisión máximo de 20 ocurre cuando la energía de los portadores alcanza el nivel del potencial químico $E = E_F = 0$. Asimismo, observamos que los saltos en la cuantización del coeficiente de transmisión ocurren en valores de energía donde la DOS presenta las discontinuidades de Van-Hove. Los resultados encontrados para el coeficiente de transmisión y la DOS de la red finita son equivalentes con los coeficientes de transmisión y la DOS de una nanocinta formada por una red cuadrada de ancho $y = 20a_x$, debido esencialmente a las condiciones de transporte balístico asumidas en el formalismo de Landauer, en la que los procesos de esparcimiento (*scattering*) de los electrones en la red rectangular finita ocurren únicamente en las interfaces entre la red finita y los electrodos, dependiendo la cuantización del coeficiente de transmisión solamente del ancho y .

Los efectos de la presencia de los nanoporos en el conductor rectangular en el

transporte electrónico se muestran en las figuras 44(c), (e) y (g), donde se observan que el coeficiente de transmisión disminuye con respecto al coeficiente de transmisión sin poros Fig. 44(a), dicha disminución se acentúa a medida que el ancho W del nanoporo aumenta. También se observa que la cuantización en números enteros de e^2/h del coeficiente de transmisión se va perdiendo, además se observa que el coeficiente de transmisión es independientes de la longitud D del nanoporo, corroborando el aspecto balístico del transporte.

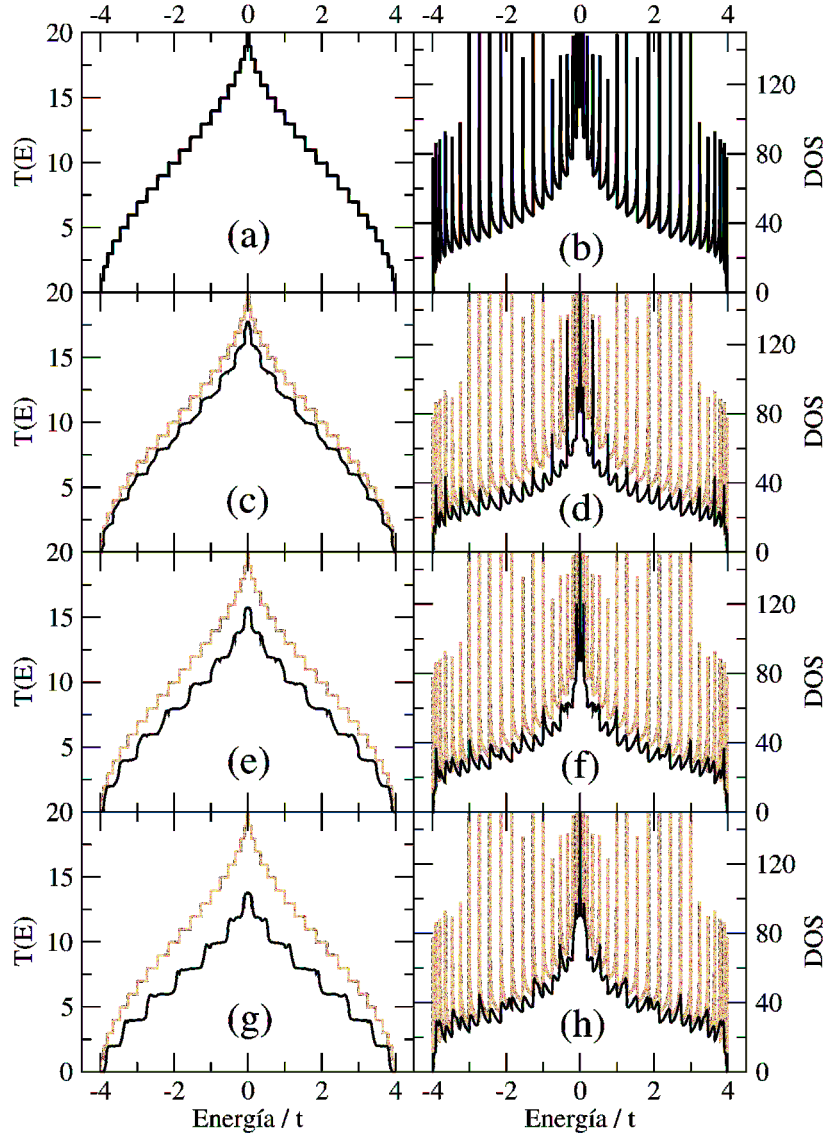


Figura 44: Se muestran los coeficientes de transmisión (izquierda) y DOS (derecha) para una red rectangular sin poros (a) y (b); para redes rectangulares con poros de $D=9a_x$ y $W=3a_y$, (c) y (d); $D=9a_x$ y $W=5a_y$, (e) y (f); y $D=9a_x$ y $W=7a_y$, (g) y (h), respectivamente.

Los resultados para las DOS que muestran las figuras 44(d), (f) y (h) indican una disminución progresiva respecto a la DOS sin poros, figura 44(a), principalmente en aquellos valores de energía donde la DOS presenta las discontinuidades de Van-Hove, es decir, que el número de estados permitidos en el sistema disminuye por la presencia del nanoporo y el aumento del tamaño del nanoporo en la dirección y .

A continuación escogemos un nanoporo cuadrado de dimensiones $D=W=9a_x$, en el centro del mismo simulamos la presencia de una molécula unidimensional orientadas en la dirección x y luego otra molécula en la dirección y tal como se observa esquemáticamente en la Figura 45. Consideramos que las moléculas presentan una interacción entre sus átomos en el esquema *tight-binding* con parámetro de hopping t_m , de modo que el hamiltoniano molecular está dado por $H_m = \sum t_m[|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|]$, siendo $|i\rangle$ los autoestados de energía asociados a los orbitales tipo s de los sitios de los átomos. Asimismo la interacción entre el nanoporo y la molécula se asume, también, dentro del modelo *tight-binding*, de modo que un átomo de la molécula interactúa con el primer sitio más próximo del nanoporo por medio del parámetro de *hopping* t_{mp} dado por

$$t_{mp} = -\frac{\hbar^2}{2mb^2} = -\frac{\hbar^2}{2m(r_{x,y}a_{x,y})^2} = \frac{t_{x,y}}{r_{x,y}^2} \quad (5.6)$$

siendo $b = r_{x,y}a_{x,y}$ la distancia en la dirección paralela x y perpendicular y a la corriente entre la molécula y el nanoporo.

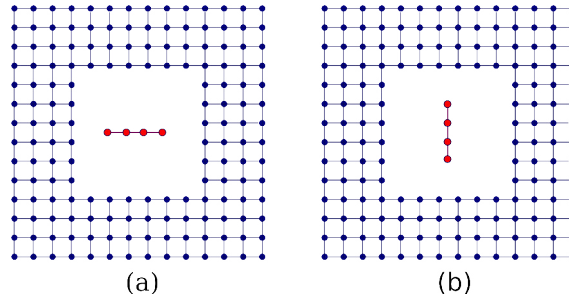


Figura 45: Representación esquemática de un nanoporo cuadrado con $D=W$ y una molécula de cuatro átomos colineales orientados en dirección paralela (a) y en la dirección perpendicular (b) al flujo de la corriente.

Los resultados para el coeficiente de transmisión del sistema con un nanoporo de dimensiones $D=W=9a_x$ en la cual se encuentra una molécula lineal de cuatro átomos con acoplamiento $t_m = t$ se muestran en la figura 46, donde las curvas en negrita representan los coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo y la presencia de la

molécula, mientras que las curvas azules corresponden a los coeficientes de transmisión del sistema con nanoporo sin la presencia de moléculas. La figura 46(a) corresponde al coeficiente de transmisión asociado al nanoporo con una molécula orientada paralelo al flujo de la corriente, Figura 45(a), donde la presencia de la molécula en el nanoporo produce resonancias (ver en el *inset* de la Fig.46(a)) en el coeficiente de transmisión en cuatro valores de energía $E/t = \pm 0.62; \pm 1.62$, que corresponden al acoplamiento entre los átomos que componen la molécula. En la figura 46(b) observamos que el coeficiente de transmisión para el sistema con nanoporo y con molécula orientada perpendicularmente al flujo de corriente, Figura 45(b), los coeficientes de transmisión próximos al potencial químico ($T=0$) o energía de Fermi presentan antiresonancias (ver *inset* de la Fig.46(b)) mientras que para energías no muy próximas al nivel de Fermi, las resonancias son muy bajas.

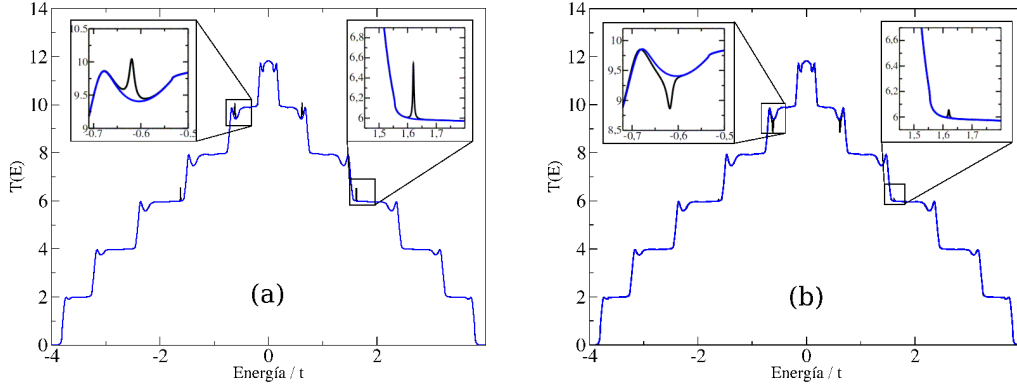


Figura 46: Se muestran los coeficientes de transmisión en un conductor con un nanoporo rectangular de dimensiones $D=W=9a_x$, en la presencia de una molécula lineal con cuatro átomos orientada paralela (a) y perpendicularmente (b) al flujo de corriente eléctrica. En el primer caso se presentan resonancias y en el segundo anti-resonancias (ver *insets*).

Debido a que las resonancias y antiresonancias que se observan en los coeficientes de transmisión son pequeñas, en las figuras siguientes representamos las variaciones del coeficiente de transmisión ΔT que mide la diferencia del coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo con la presencia de la molécula y del coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo sin la molécula. Los resultados que se muestran en la Figura 47 corresponden a $\Delta T(E)$ para el sistema con un nanoporo con moléculas orientadas paralelas a la corriente de portadores de carga, de modo que las moléculas varían en el número de sus componentes atómicos. Los resultados para una molécula con tres átomos se muestran en la Fig. 47(a) presentando tres picos en $E/t = 0.0; \pm 1.43$;

para una molécula compuesta con cuatro átomos, la Fig. 47(b), muestra los picos correspondientes a cuatro energías $E/t = \pm 0.62; 1.62$; para una molécula con 5 átomos, la Fig. 47(c), presenta los picos en $E/t = 0.0; \pm 1.0; \pm 1.73$; y finalmente, para una molécula compuesta por seis átomos, la Fig. 47(d), presenta los picos en los seis valores de energías dados por $E/t = \pm 0.46; \pm 1.25; \pm 1.80$. Estos resultados indican exactamente la distribución espectral de la energía de acoplamiento de un número dado de átomos que conforman la molécula, asimismo observamos que la altura de los picos son mayores a medida que el número de átomos de la molécula aumenta.

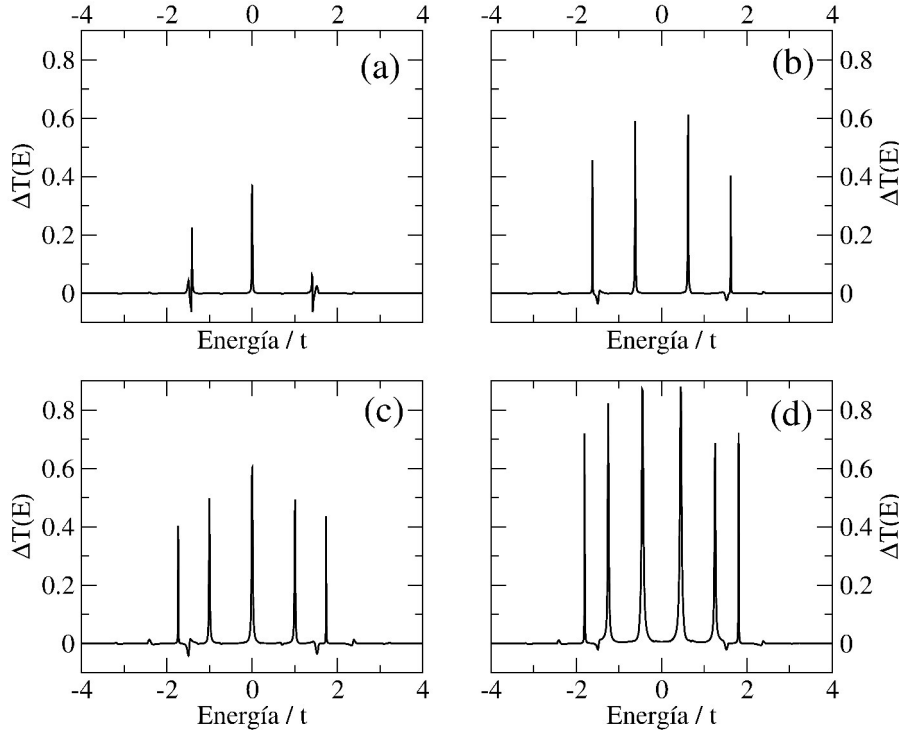


Figura 47: Variación del coeficiente de transmisión, ΔT , para un conductor con un nanoporo de dimensiones $D=W=9a$ y con la presencia de moléculas lineales con varios átomos idénticos (a) 3 átomos, (b) 4 átomos, (c) 5 átomos y (d) 6 átomos, paralelos a la corriente de portadores.

A diferencia de la figura 47 donde las moléculas lineales son paralelas al flujo de la corriente, en la figura 48 mostramos resultados correspondientes a moléculas lineales orientados en dirección perpendicular a la corriente de portadores, observándose que las resonancias y antiresonancias ocurren en cada caso para los mismos valores de energía, predominando en todos los casos las antiresonancias respecto a las resonancias.

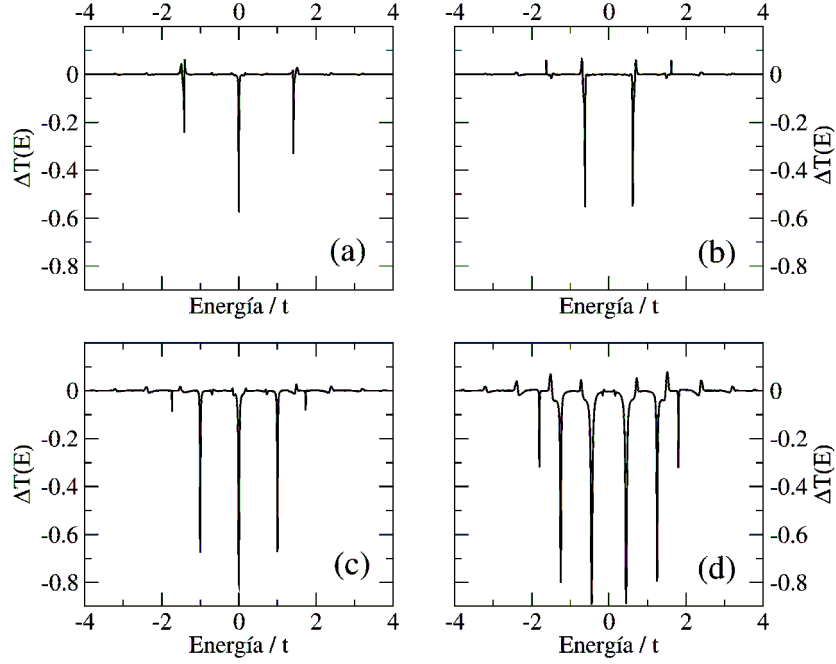


Figura 48: Variación del coeficiente de transmisión, ΔT , para un conductor con un nanoporo de dimensiones $D=W=9a$ y con la presencia de moléculas lineales con varios átomos idénticos (a) 3 átomos, (b) 4 átomos, (c) 5 átomos y (d) 6 átomos, perpendiculares a la corriente de portadores.

Con el fin de emular el efecto en el nanoporo de moléculas diferentes a las moléculas lineales consideramos moléculas mostradas en la figura 49, que se encuentran en el centro de un nanoporo rectangular de dimensiones $D = W = 9a_x$ y teniendo en cuenta que cada sitio de la molécula interactúa con su vecino próximo con el parámetro de Hopping $t_m = t$, los espectros correspondientes para ΔT se muestran en la figura 50, en las cuales los picos positivos indican valores de energía en las cuales la molécula produce un incremento en el transporte electrónico a través del nanoporo y los picos negativos, indican que en dichos valores de energía produce un aumento en la resistividad eléctrica, que disminuye el transporte electrónico.

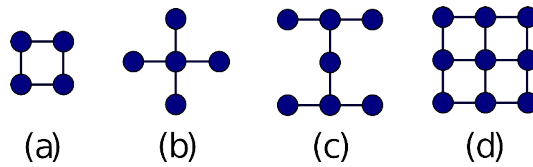


Figura 49: Diferentes tipos de moléculas que se consideran en el centro del nanoporo

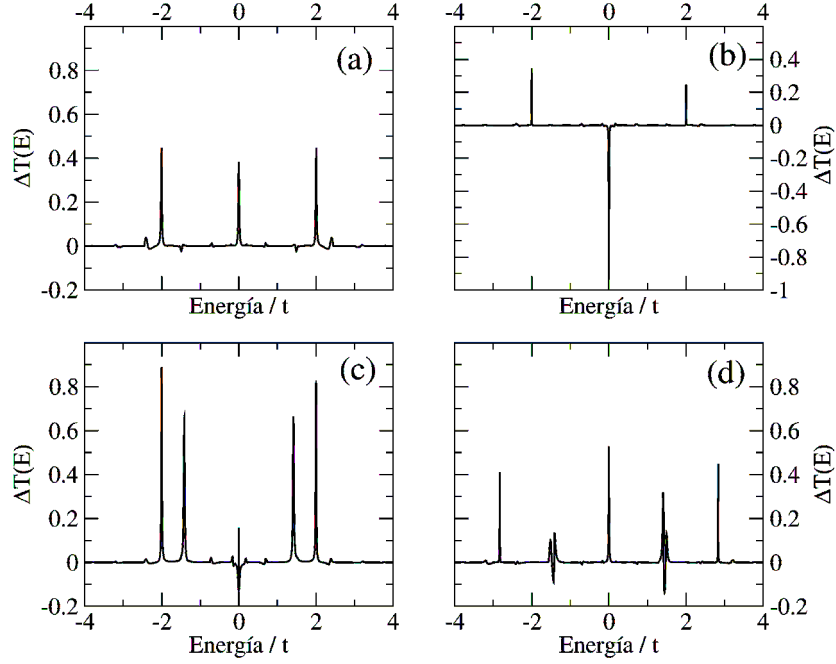


Figura 50: Variación del coeficiente de transmisión ΔT de nanoporo con $D = W = 9a$ bajo la presencia de moléculas representadas en la figura 49 respectivamente.

Conclusiones

En un nanoporo rectangular construido en una red rectangular que emula al GaAs el transporte de carga depende del ancho del nanoporo, afirmación que se sustenta en el hecho de que el coeficiente de transmisión disminuye a medida que incrementa el ancho del nanoporo.

Las moléculas presentes en el centro del nanoporo rectangular producen picos en el espectro de ΔT que son característicos para cada tipo de molécula, dichos picos dependen del tipo de átomo, y número de átomos que constituyen la molécula, así mismo dependen de la forma en el cual se distribuyen los átomos en la molécula. Estas características proporcionan la posibilidad de utilizar los nanoporos de carbono como una técnica espectroscópica para el análisis de materiales, para tal fin se requiere construir una base de datos completa de cambios en la conductancia eléctrica (coeficiente de transmisión) producida por diferentes moléculas y desarrollar técnicas experimentales que permitan medir los pequeños cambios en el transporte de carga.

5.2. Nanoporos de grafeno

En esta sección analizamos el transporte electrónico en nanoporos rectangulares contruidos en una red de grafeno considerando el efecto producido en el transporte electrónico debido a la presencia de moléculas con diferentes configuraciones en el centro del nanoporo, el comportamiento de los electrones es descrito utilizando el método los enlaces fuertes (*tight-binding*), el transporte electrónico se realiza en régimen balístico por medio de la formula de Landauer, y las funciones de Green.

Como punto de partida para el estudio consideramos que el nanoporo de grafeno es un nanodispositivo conectado a dos electrodos metálicos semi-infinitos, que debido a sus pequeñas dimensiones tiene una conductancia eléctrica cuantizada en múltiplos de la unidad de conductancia cuántica $G_0 = e^2/h$.

En los últimos años el transporte de carga a través de nanodispositivos moleculares ha despertado gran interés en diferentes grupos de investigación. Particularmente las moléculas que despiertan mayor interés son los cuatro monómeros o nucleótidos del ácido desoxirribonucleico, ADN, que consisten de dos partes, la primera es un azúcar, desoxirribosa, con un grupo fosfato adherido, mientras que la segunda es una base que puede ser la adenina (A), guanina (G), citosina (C) o timina (T) [78]. El esqueleto del ADN está formado por dos cadenas que forman los azúcares unidos a través de los grupos fosfatos y las bases se colocan perpendiculares a las cadenas de modo que unen a las mismas pero sin repetir la base en el mismo lugar de las dos cadenas, las bases se unen como CG y AT, o GC y TA a través de dos pares ligados de hidrógeno [78]. Como mencionamos al inicio del capítulo los nanoporos de grafeno surgen surgen como una alternativa poderosa para el análisis de moléculas y el secuenciamiento del ADN, esto es posible gracias a que el espesor del grafeno es de un átomo, propiedad que permite leer pequeñas variaciones que sufre la corriente del nanoporo cuando una molécula pasa a través de nanoporo, estas variaciones son característicos del tipo de molécula y sus átomos constituyentes. La secuenciación del ADN usando nanoporos ofrece grandes ventajas respecto a los métodos bioquímicos por ser un proceso de lectura de moléculas rápida y directa, y no requiere complejos procesos bioquímicos de crecimiento, clonado y reacciones químicas necesarios en los procesos bioquímicos. Varios grupos de investigadores han reportado muchas características del transporte de carga de moléculas de ADN, se conoce que cada nucleótido adenina (A), guanina (G), citosina (C) y timina (T) producen una relación corriente - voltage característico [68, 72, 77, 81], los resultados muestran el transporte de carga a lo largo

del esqueleto de segmentos de ADN y el transporte de carga en cada nucleótido en la dirección transversal al esqueleto del ADN. La finalidad de la secuenciación del ADN es la determinación del orden de los nucleótidos (A, C, G y T) que constituye la información genética heredable del núcleo celular en plantas y animales, por tanto es útil en el estudio de los procesos biológicos fundamentales que permiten determinar mutaciones, presencia de células cancerígenas, etc. Las primeras pruebas experimentales de translocación de moléculas de ADN fueron reportados en 1996 usando nanoporos biológicos [82].

La idea de utilizar nanoporos de grafeno en el proceso de análisis de moléculas individuales y la secuenciación del ADN es medir los perfiles de conductancia del nanoporo y observar las pequeñas variaciones que sufre el perfil de conductancia cuando una molécula o un nucleótido de ADN se encuentra en el centro del nanoporo, dichas variaciones del perfil de conductancia son característicos del tipo de molécula y permiten por tanto una lectura rápida y directa del tipo de molécula que se encuentra en el centro del nanoporo. En la actualidad se viene trabajando fuertemente en el desarrollo de técnicas de medición de corriente que sean sensibles a las pequeños cambios de corriente originadas por las moléculas y que permitan la producción comercial de los dispositivos de secuenciamiento de ADN.

En el presente estudio la interacción de los electrones con los átomos del nanodispositivo se describe dentro del modelo de enlaces fuertes (método del *tight-binding*) a primeros vecinos y el transporte de carga se analiza en el régimen balístico, caso en el que la dispersión de las cargas eléctricas que ingresan al nanodispositivo desde los electrodos se realiza solamente en las superficies de contacto entre el nanodispositivo y los electrodos y en los bordes de los nanoporos.

5.2.1. El modelo

El diagrama esquemático de un nanoporo rectangular de grafeno conectado a electrodos ideales semi-infinitos con potenciales químicos μ_L y μ_R se muestra en la figura 51, donde consideramos que el electrodo izquierdo de potencial químico μ_L es la fuente de portadores de carga y el electrodo derecho con potencial químico μ_R es el sumidero. El transporte electrónico se considera balístico, es decir que los portadores de carga que proceden de los contactos hacia el nanoporo sufren dispersión solo en las interfaces entre el nanoporo y los contactos y en el borde del nanoporo, de modo que

toda carga eléctrica que procede del contacto izquierdo con energía igual a μ_L y que alcanza el contacto derecho no regresa hacia el contacto izquierdo, de la misma forma toda carga eléctrica que ingresa por el contacto derecho con energía μ_R y alcanza al contacto izquierdo no volverá hacia el contacto derecho.

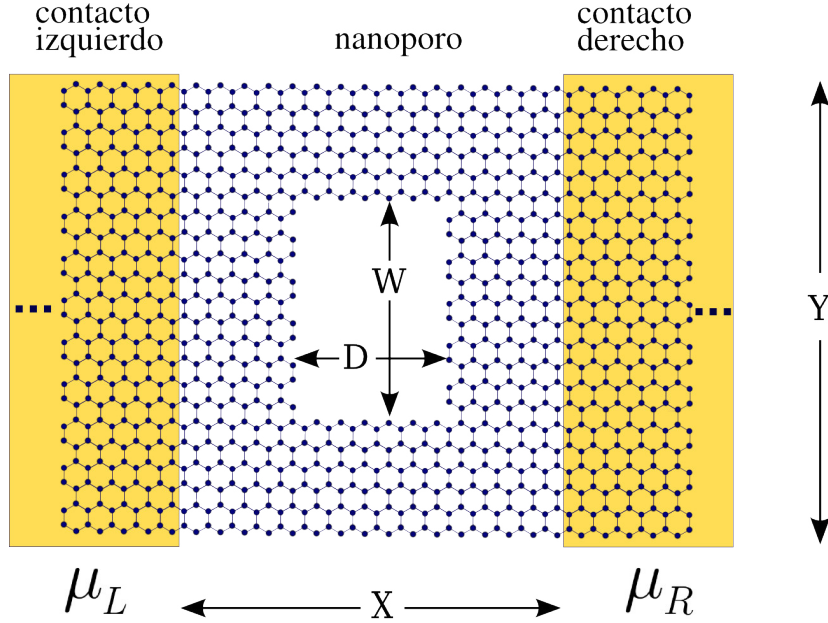


Figura 51: Representación esquemática del modelo de nanoporo rectangular en grafeno conectado a dos electrodos semi-infinitos de borde zigzag

De acuerdo a la figura 51 el nanoporo rectangular de longitud D y ancho W es construido en una red finita de grafeno de longitud X y ancho Y , y se encuentra conectada a dos electrodos ideales a potenciales químicos μ_L y μ_R . El análisis del transporte de carga se efectúa dentro de la formulación de Landauer [40,80,83,84] donde la conductancia eléctrica G se determina en función del coeficiente de transmisión $T(E)$ como

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_F), \quad (5.7)$$

Contexto en el cual nuestro primer paso es determinar la conductancia del sistema formado por la red finita de dimensiones $X \times Y$ de grafeno con dos contactos, el segundo paso es obtener la conductancia del nanoporo de dimensiones $D \times W$ construido en

la red finita de grafeno, y el tercer paso es calcular la conductancia considerando la presencia de moléculas de diferentes configuraciones en el centro del nanoporo.

La interacción entre sitios atómicos en el nanoporo se consideran dentro de la interacción *tight-binding*, descrita en la sección 2.1 en términos de los estados cuánticos $|\varphi_j^A\rangle$ y $|\varphi_j^B\rangle$ asociados a las sub redes triangulares A y B del grafeno como

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} |\varphi_j^A\rangle \langle \varphi_i^B| + h.c., \quad (5.8)$$

donde $t = -2.8$ eV es el parámetro de hopping y $\langle i,j \rangle$ indica que la suma se efectúa sobre los vecinos próximos.

Para simular el efecto de las moléculas - que se encuentran en el centro del nanoporo - construimos un algoritmo que incluye en el hamiltoniano del nanoporo al hamiltoniano correspondiente a la molécula y la interacción de la molécula con el nanoporo. La interacción entre los átomos de la propia molécula, así como la interacción de la molécula con el borde que define al nanoporo se efectúa dentro de la aproximación *tight-binding*.

El algoritmo que permite calcular la conductancia G del nanoporo utilizando la ecuación (5.7) calcula primero las funciones de Green g_q de los contactos izquierdo ($q = L$) y derecho ($q = R$), teniendo en cuenta que cada contacto se encuentra formada por cadenas verticales periódicas, donde cada cadena interactúa solo con las cadenas paralelas y vecinas a izquierda y derecha, esta propiedad permite obtener g_q utilizando el método de convergencia rápida [50, 51]. Segundo calcula las auto-energías Σ_q y las matrices de acoplamiento $\Gamma_q = i(\Sigma_q - \Sigma_q^\dagger)$ de los contactos. Tercero calcula la función de Green del sistema nanodispositivo y contactos usando las funciones de Green fuera de equilibrio, que de acuerdo a la sección 3.2.2 se expresa como:

$$G = [EI - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (5.9)$$

aquí I es la matriz identidad, H_D el hamiltoniano del nanodispositivo en estudio y Σ_L , Σ_R son las autoenergías asociadas a los contactos izquierdo y derecho respectivamente. Cuarto calcula el coeficiente de transmisión del sistema completo como

$$T(E) = Tr[\Gamma_L G_D \Gamma_R G_D^\dagger], \quad (5.10)$$

y la densidad de estados, DOS, que proporciona la cantidad de estados disponibles por cada energía permitida E como

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr}[\text{Im}(G(E))]. \quad (5.11)$$

5.2.2. Resultados y discusión

Simulamos primero una red finita de grafeno de longitud $X = 20\sqrt{3}a$ y ancho $Y = 28a$ con dos contactos, considerando interacción a primeros vecinos con parámetro de acoplamiento de *Hopping* $t = -2.8$ eV. Los contactos semi-infinitos se consideran cintas de grafeno de ancho Y con el mismo parámetro de *Hopping* que la red finita. Debido a las pequeñas dimensiones de la red finita los coeficientes de transmisión encontrados se encuentran cuantizados en valores enteros que van de 0 hasta 18 como se muestran en la figura 52(a), la densidad de estados correspondiente a este sistema muestra que los saltos en el coeficiente de transmisión ocurren en las discontinuidades de Van-Hove como se observa en la figura 52(b). Los resultados del coeficiente de transmisión y la DOS son equivalentes al de un nanoribbons de borde zigzag 18-zgnr, debido a las condiciones de transporte balístico [59, 65] asumidas en el formalismo de Landauer, es decir el resultado de $T(E)$ es independiente de la longitud X del sistema, dependiendo la cuantización solamente del ancho Y . El nanoribbons tiene naturaleza conductora debido a que en las proximidades de $E_F = 0$ tenemos que $T(E) \neq 1$, es decir no existe presencia de un gap de energía entre la banda de conducción y valencia.

Con la finalidad de observar los cambios que sufre el coeficiente de transmisión de la red finita de grafeno de dimensiones $X \times Y$ bajo la presencia de nanoporos, las dimensiones del nanoporo se muestran en la figura 51, donde D es la longitud del nanoporo y W es el ancho del nanoporo. Los efectos producidos por la presencia de nanoporos rectangulares de diferentes dimensiones $D \times W$ sobre el coeficiente de transmisión $T(E)$ se muestran en las figuras 52(c), (e) y (g), casos en las que se consideró $D = 7\sqrt{3}a$ y distintos anchos $W = 4a$, $W = 7a$ y $W = 10a$ respectivamente. El resultado muestra que el coeficiente de transmisión del sistema con presencia de poros es menor que el coeficiente de transmisión sin presencia de poros, dada en la figura 52(a), esta disminución se acentúa a medida que el ancho W del poro aumenta, así mismo debido a las características de transporte balístico los resultados son invariables respecto a la longitud D del nanoporo, se observa también que la cuantización en

múltiplos enteros de la conductancia cuántica e^2/h se va perdiendo.

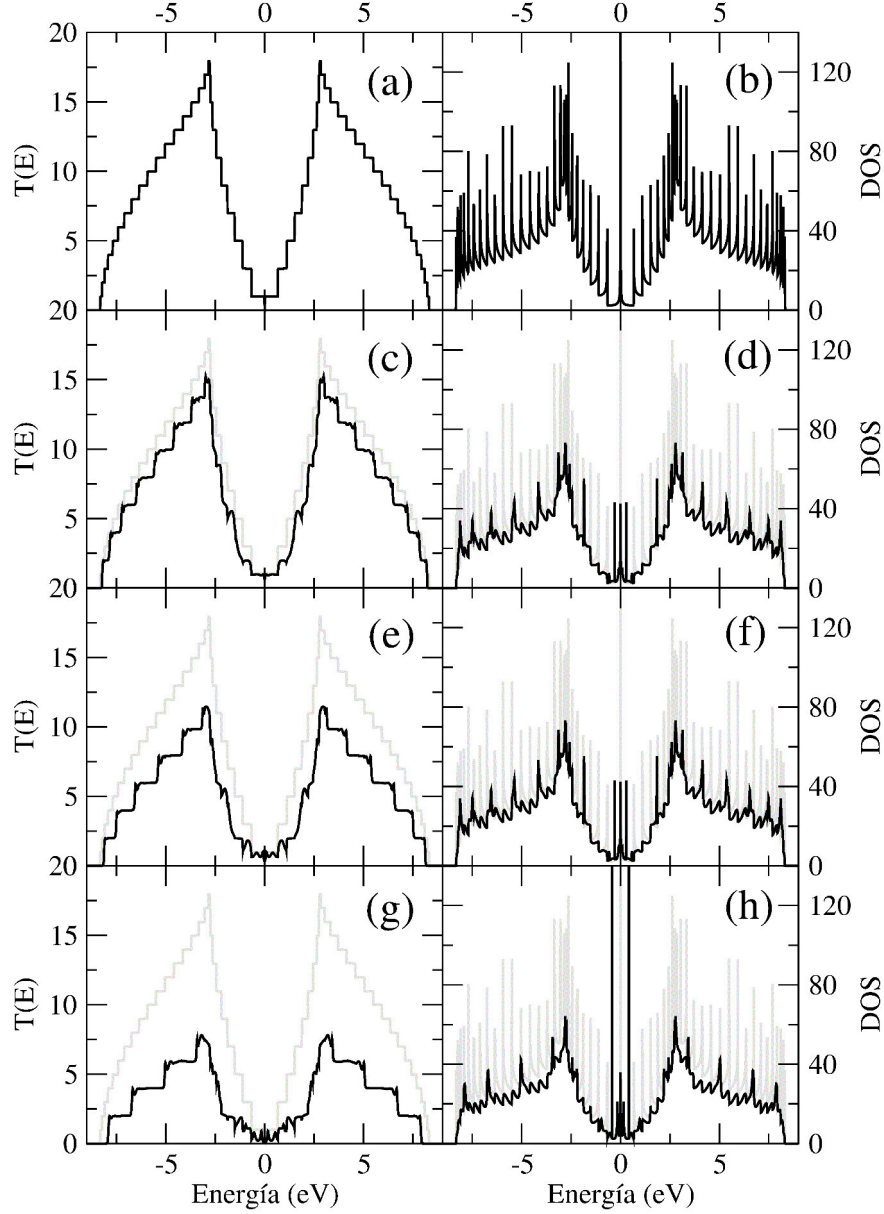


Figura 52: Coeficientes de transmisión (izquierda) y Densidad de estados (derecha) para una red finita de grafeno con dos contactos y sin poros (a) y (b), para la red de grafeno con poros (c) y (d) $D = 7\sqrt{3}a$ y $W = 4a$ (e) y (f) $D = 7\sqrt{3}a$ y $W = 7a$ (g) y (h) $D = 7\sqrt{3}a$ y $W = 10a$

Los resultados mostrados en las figuras 52(d), (f), y (h) muestran que la DOS del sistema con presencia de poros es menor que la DOS del sistema sin presencia de

poros, dada en la figura 52(a), la disminución se acentúa principalmente en aquellos valores de energía donde sin la presencia de poros se presentaban las discontinuidades de Van-Hove, esto se debe a medida que se incrementa el tamaño del poro el número de estados permitidos en el sistema disminuye. En los nanoporos rectangulares estudiados la disminución en la DOS del sistema con poros depende de la medida del ancho W del nanoporo y es independiente de la longitud D del nanoporo, ello debido a las características de transporte balístico considerado.

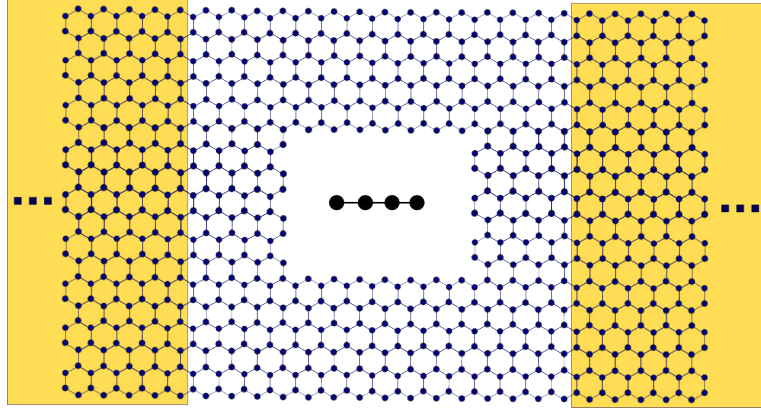


Figura 53: Representación esquemática de un nanoporo rectangular de grafeno con una molécula compuesta por cuatro átomos colineales

A continuación dentro de nanoporo de longitud $D = 7\sqrt{3}a$ y ancho $W = 7a$, cuyos coeficientes de transmisión y DOS son dados en la figura 44(c) y (d) respectivamente emulamos la presencia de una molécula lineal orientada en la dirección del eje x , esta molécula lineal es una red unidimensional finita como muestra la figura 53. Consideramos que la interacción entre sitios atómicos de la molécula es dada dentro de la aproximación *tight-binding* con el parámetro de *Hopping* t_m , de modo que el hamiltoniano molecular es dado por $H_m = -\sum t_m [|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|]$ siendo $|i\rangle$ los estados cuánticos asociados a los orbitales tipo s de los sitios atómicos de la molécula. Del mismo modo la interacción entre el nanoporo y la molécula se asume también dentro del modelo del *tight-binding*, de modo que cada sitio de la molécula interactúa con el primer sitio más próximo del nanoporo por medio del parámetro de hopping t_{mp} dado por

$$t_{mp} = -\frac{\hbar^2}{2mb^2} = -\frac{\hbar^2}{2m(r_{x,y}a_{x,y})^2} = \frac{t}{r_{x,y}^2}, \quad (5.12)$$

siendo $b = r_{x,y}a_{x,y}$ la distancia de cada sitio de la molécula en la dirección paralela x y perpendicular y a la corriente eléctrica, hacia el sitio atómico mas próximo del borde que define el nanoporo.

Los resultados obtenidos para el coeficiente de transmisión del nanoporo con la presencia de una molécula lineal de cuatro átomos ubicada en el centro del nanoporo como se muestra en la figura 53 es representada en la figura 54, donde se considera que cada sitio atómico de la molécula interactúa con sus vecinos próximos de la propia molécula con el parámetro de *Hopping* $t_m = 1.2t$, las curvas de color negro representan el coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo y la presencia de la molécula y la curva en color azul es el coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo pero si la presencia de la molécula. La presencia de la molécula dentro del nanoporo produce resonancias y antiresonancias en el coeficiente de transmisión, que ocurren en cuatro valores de energía $E = \pm 2.05$ eV ; ± 5.34 eV, estas resonancias y antiresonancias (ver *inset* de la Fig. 54) corresponden al acoplamiento entre los sitios de la molécula.

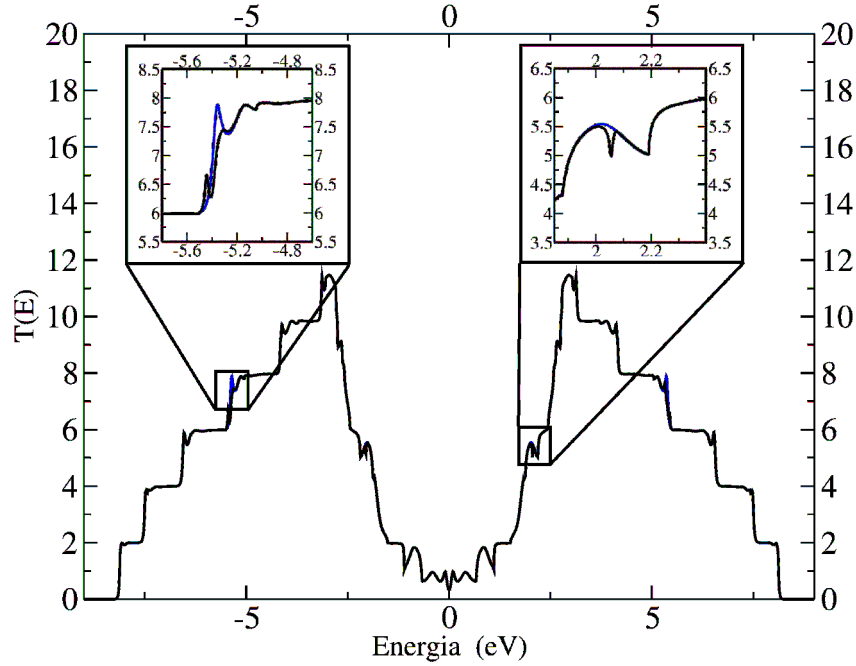


Figura 54: Coeficiente de transmisión de nanoporo rectangular de grafeno bajo la presencia de una molécula lineal de cuatro átomos de la figura 53.

Debido a que las resonancias y antiresonancias que se observan en los coeficientes de transmisión son pequeñas en las figuras siguientes representamos las variaciones del

coeficiente de transmisión ΔT en lugar del coeficiente de transmisión $T(E)$, ΔT mide la diferencia del coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo y el coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo y la presencia de la molécula, de modo que las resonancias se representan por picos negativos en ΔT y las antiresonancias por picos positivos en ΔT . Para las figuras siguientes consideramos un nanoporo de longitud $D = 7\sqrt{3}a$ y ancho $W = 7a$, cuyo coeficiente de transmisión es representado en la figura 52(e). Los resultados mostrados en la figura 55 representan ΔT en función de energía del sistema con nanoporo y la presencia en el centro del nanoporo de moléculas lineales compuesta por distinto número de átomos. Los átomos que constituyen a la molécula se consideran idénticos e interactúan entre sí con un parámetro de Hopping $t_m = t$.

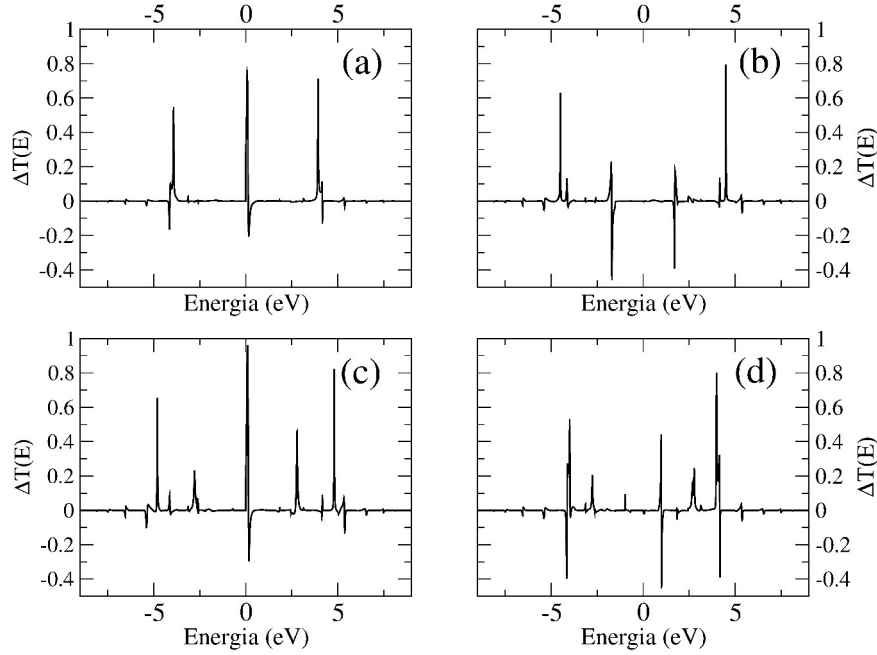


Figura 55: Variación del coeficiente de transmisión ΔT de nanoporos rectangulares de grafeno bajo la presencia de moléculas lineales formadas por diferente número de átomos idénticos (a) 3 átomos, (b) 4 átomos, (c) 5 átomos y (d) 6 átomos.

Los resultados obtenidos para ΔT cuando la molécula en el centro del nanoporo es compuesta por tres átomos colineales se muestran en la figura 55(a), donde se observan tres picos para ΔT en las energías $E = 0; \pm 3.9$ eV; para una molécula lineal compuesta por cuatro átomos idénticos, la figura 55(b) muestra cuatro picos en ΔT en las energías $E = \pm 1.8; \pm 4.5$ eV; si la molécula se compone de cinco átomos existen cinco picos en ΔT en las energías $E = 0.0; \pm 2.8; \pm 4.8$ eV como muestra la figura 55(c); y finalmente

si la molécula se compone de seis átomos ΔT presenta seis picos, que ocurren en las energías $E = \pm 0.98; \pm 2.78; \pm 4.0$ eV mostrados en la figura 55(d). Estos resultados indican que la distribución espectral de la energía de acoplamiento de un número de átomos que componen la molécula lineal generan exactamente el mismo número de picos en el perfil de ΔT , asimismo la intensidad de los picos en ΔT son mas intensos para determinados valores de energía.

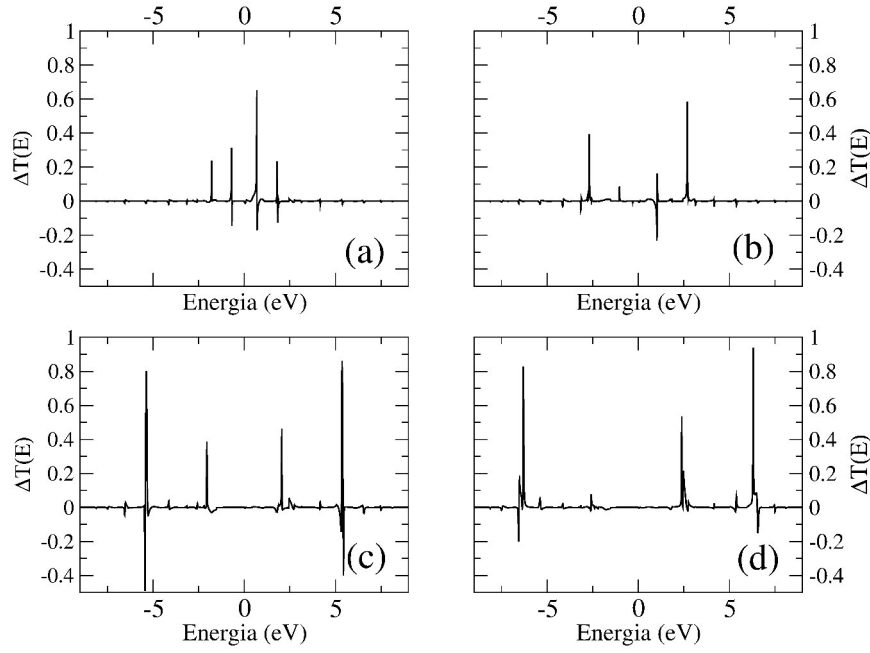


Figura 56: Variación del coeficiente de transmisión ΔT de nanoporo rectangular de grafeno bajo la presencia de una molécula lineal de cuatro átomos de la figura 53 con distintos parámetros de *Hopping* t_m (a) $t_m = 0.6t$, (b) $t_m = 0.8t$, (c) $t_m = 1.2t$ y (d) $t_m = 1.4t$.

Con la finalidad de emular el efecto de moléculas formadas por cuatro átomos colineales de diferentes tipos, calculamos los perfiles de ΔT considerando que cada sitio atómico de la molécula interactúa entre sí con parámetros de *Hopping* t_m variable. Los resultados se muestran en la figura 56, donde la figura 56(a) corresponde al parámetro de *Hopping* entre sitios de la molécula dados por $t_m = 0.6t$, resultando que los picos en ΔT ocurren en las energías $E = \pm 0.7; \pm 1.8$ eV; la figura 56(b) corresponde a una molécula lineal con cuatro átomos que interactúan entre sí con el parámetro de *Hopping* $t_m = 0.8t$ encontrándose que los picos en ΔT ocurren en las energías $E = \pm 1.0; 2.7$ eV; si el parámetro de *Hopping* entre sitios de la molécula es $t_m = 1.2t$ los picos en ΔT ocurren en las energías $E = \pm 2.0; \pm 5.4$ eV como muestra la figura 56(c), finalmente la

figura 56(d) corresponde al caso cuando los átomos de la molécula lineal interactúan entre sí con el parámetro de *Hopping* $t_m = 1.4t$ apareciendo los picos en ΔT en las energías $E = \pm 2.5; \pm 6.4$ eV. De acuerdo a estos resultados inferimos que el nanoporo permite leer moléculas con estructuras similares pero compuesta por átomos distintos, dado que los picos que aparecen en ΔT ocurren para valores de energía totalmente diferentes.

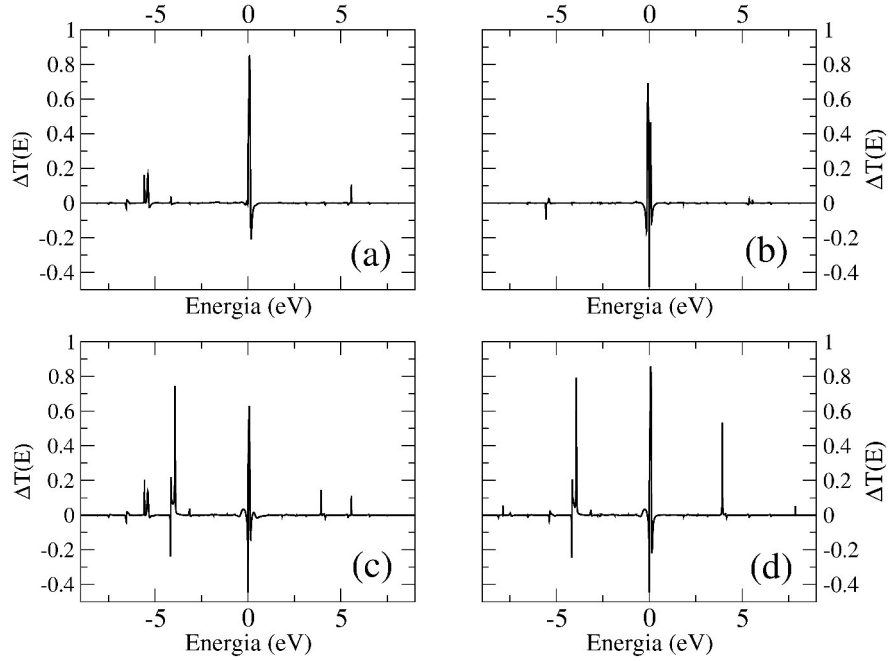


Figura 57: Variación del coeficiente de transmisión ΔT de nanoporo rectangular de grafeno con presencia de moléculas de distintos tipos mostrados en la figura 49 respectivamente.

Por otro lado con el fin de emular el efecto producido en el transporte de carga del nanoporo debido a la presencia de moléculas diferentes a las moléculas lineales consideramos en el nanoporo de longitud $D = 7\sqrt{3}a$ y ancho $W = 7a$ moléculas de las configuraciones mostradas en la figura 49, teniendo en cuenta que cada sitio atómico de la molécula interactúan entre sí con el parámetro de Hopping $t_m = t$, los espectros correspondientes para ΔT se muestran en la figura 57, en los cuales se observa que los picos en ΔT ocurren para diferentes valores de energía, los picos positivos representan antiresonancias, debido a que ΔT es dado como la diferencia entre $T(E)$ del sistema con nanoporo y el $T(E)$ del sistema con nanoporo y molécula, las resonancias se representan por picos negativos de ΔT , de acuerdo a los resultados mostrados las antiresonancias predominan sobre las resonancias en todos los casos, hecho que implica que la presencia de las moléculas dentro del nanoporo producía

en general un incremento de la resistencia eléctrica y consecuentemente provoca la disminución de la corriente eléctrica del nanoporo, así mismo debido a las formas en las cuales fueron tomados los modelos de molécula el número de picos no coincide con el número de átomos de constituyen la molécula, pero los resultados son particularmente característicos del tipo de molécula considerada.

Conclusiones

En un nanoporo rectangular construido en una red finita de grafeno conectado a contacto ideales el transporte de carga depende del ancho del nanoporo, afirmación que se sustenta en las condiciones de transporte balístico considerado y que de acuerdo a los resultados el coeficiente de transmisión disminuye a medida que el ancho del nanoporo aumenta.

Las moléculas presentes en el centro del nanoporo rectangular producen picos en el espectro de ΔT que son característicos para cada tipo de molécula, dichos picos dependen del tipo de átomo, y el número de átomos que forman la molécula, asimismo depende de la forma estructural en el que cada uno de los átomos se distribuyen dentro de la molécula. En particular para moléculas lineales el número de picos de ΔT coincide exactamente con el número de átomos constituyentes de la molécula, y varía con el tipo de átomos de forman la molécula, esta afirmación no se verifica en moléculas no lineales, pero se encuentra, que los espectros de ΔT son muy particulares en cada caso. Las particularidades que presentan los espectros de ΔT abren la posibilidad de utilizar los nanoporos de grafeno como una técnica espectroscópica para el análisis de materiales, para tal fin se requiere construir una base de datos completa de cambios en la conductancia eléctrica (coeficiente de transmisión) producida por las diferentes moléculas que existen en la naturaleza y así mismo desarrollar tecnicas experimentales que permitan medir los pequeños cambios en el transporte de carga.

Capítulo 6

Conclusiones

En el punto cuántico con 4 contactos la fórmula de Landauer-Bütiker indica que la resistencia Hall R_H es asimétrico respecto a $E_F = 0$ a diferencia de la resistencia longitudinal R_L que es simétrica respecto a $E_F = 0$. Para campos magnéticos débiles (α pequeño) la formación de los niveles de Landau depende del tamaño del punto cuántico, observándose estos niveles con mayor definición cuando las dimensiones del punto cuántico son grandes. Asimismo el valor absoluto de la resistencia Hall $|R_H|$ alcanza picos muy altos para determinados valores de energía en las cuales el campo magnético produce transiciones de fase cuánticas.

El transporte electrónico de los nanoribbons depende del ancho de los nanoribbons y las condiciones de borde zigzag, armchair y/o bearded, ocurriendo que paracualquier ancho W los nanoribbons zigzag tienen comportamiento conductor, los nanoribbons armchair tienen comportamiento semi-metálico si el número de dímeros N de la cadena unidad verifica que $M = (N + 1)/3$ es un número entero positivo, caso contrario los nanoribbons armchair tienen comportamiento semiconductor. Los nanoribbons de borde bearded tienen comportamiento conductor, y presentan perfiles de $T(E)$ idénticas a los nanoribbons zigzag. Los nanoribbons de borde mixto zigzag - bearded tienen comportamiento semiconductor. En los casos en que el comportamiento de los nanoribbons es semiconductor el gap de energía entre la banda de conducción y valencia tiene relación inversa con el ancho del nanoribbons, es decir, el gap de energía disminuye a medida que el ancho del nanoribbons incrementa.

Un campo magnético uniforme que actúa perpendicularmente sobre un nanoribbons, introduce en los parámetros de *Hopping* un cambio de fase dado por la Sustitución de

Pierls, que produce la aparición de niveles de Landau que se observan cuando los campos magnéticos aplicados son débiles, estos niveles de Landau se transforman en subbandas de Landau cuando el campo magnético aplicado es extremadamente alto y el ancho del nanoribbons es mucho mayor al radio ciclotrónico.

En un nanoporo rectangular construido en una red rectangular que emula al GaAs o en el grafeno el transporte de carga depende del ancho del nanoporo, afirmación que se sustenta en las condiciones de transporte balístico considerado y los resultados mostrados en las figuras 44 y 52, que indican que los coeficientes de transmisión disminuyen a medida que el ancho del nanoporo aumenta.

La presencia de moléculas en el centro del nanoporo rectangular construida en una red rectangular o el grafeno producen picos en el espectro de ΔT que son característicos para cada tipo de molécula, dichos picos dependen del tipo de átomo, y el número de átomos que forman la molécula. Asimismo los valores de energía en las cuales se presentan los picos de ΔT dependen de la forma estructural en el que cada uno de los átomos se distribuyen dentro de la molécula. En particular para moléculas lineales el número de picos de ΔT coincide exactamente con el número de átomos constituyentes de la molécula, y varía con el tipo de átomos que constituyen la molécula, esta afirmación no se verifica en moléculas no lineales, pero se encuentra, que los espectros de ΔT son muy particulares en cada caso. Las particularidades que presentan los espectros de ΔT abren la posibilidad de utilizar los nanoporos de grafeno como una técnica espectroscópica para el análisis de materiales, para tal fin se requiere construir una base de datos completa de cambios en la conductancia eléctrica (coeficiente de transmisión) producida por las diferentes moléculas que existen en la naturaleza y así mismo desarrollar técnicas experimentales que permitan medir los pequeños cambios en el transporte de carga.

De la observación de las resonancias y antiresonancias producidas por la presencia de moléculas en el centro de nanoporos rectangulares en red cuadrada y en el grafeno, concluimos que en nanoporos construidos en grafeno con la presencia de moléculas las antiresonancias son predominantes respecto a las resonancias, en cambio en nanoporos construidos en redes cuadradas la predominancia de las resonancias o antiresonancias depende de la orientación de la molécula respecto al sentido de la corriente del nanoporo.

Los métodos numéricos de decimación y recursivo de convergencia rápida son eficientes para evaluar el transporte electrónico utilizando la formula de Landauer,

siendo el método recursivo de convergencia rápida mas eficiente que el método de decimación para determinar las funciones de Green de los contactos, pero para el análisis del nanodispositivo en sí es más recomendable el método de decimación por ser aplicable incluso cuando las cadenas verticales consideradas tienen estructuras diferentes, casos en las cuales el método recursivo de convergencia rápida no es aplicable, es decir una condición necesaria para la utilización del método recursivo de convergencia rápida es que las cadenas verticales que constituyen el nanodispositivo sean exactamente iguales.

Bibliografía

- [1] Geim, A. K. & Novoselov, K. S. The rise of graphene. *Nat. Mater* **6**, 183–191 (2007). URL <http://dx.doi.org/10.1038/nmat1849>.
- [2] Novoselov, K. S. *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* **306**, 666–669 (2004). URL <http://www.sciencemag.org/content/306/5696/666.abstract>.
- [3] Landau, L. D. *Statistical Physics* (Pergamon, Oxford, 1980).
- [4] Mermin, N. D. Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.* **176**, 250–254 (1968). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.176.250>.
- [5] Peierls, R. E. Bemerkungen über umwandlungstemperaturen. *Helv. Phys. Acta* **7**, 81–83 (1934).
- [6] Meyer, J. C. *et al.* The structure of suspended graphene sheets. *Nature* **446**, 60–63 (2007). URL <http://dx.doi.org/10.1038/nature05545>.
- [7] Meyer, J. C. *et al.* On the roughness of single- and bi-layer graphene membranes. *ArXiv* (2007). URL <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0703033>.
- [8] Pauling, L. *The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals: an introduction to modern structural chemistry* (Cornell University Press, Ithaca-New York, 1960).
- [9] Novoselov, K. S. *et al.* Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature* **438**, 197–200 (2005).
- [10] Gusynin, V. P. & Sharapov, S. G. Unconventional integer quantum hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.146801>.

- [11] Neto, A. H., Guinea, F. & Peres, N. M. R. Edge and surface states in the quantum hall effect in graphene. *Phys. Rev. B* **73**, 205408 (2006). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.205408>.
- [12] Peres, N. M. R., Guinea, F. & Neto, A. H. C. Electronics properties of disordered two-dimensional carbon. *Phys. Rev. B* **73** (2006).
- [13] Klitzing, K. V., Dorda, G. & Pepper, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494–497 (1980). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.494>.
- [14] Zheng, Y. & Ando, T. Hall conductivity of a two-dimensional graphite system. *Phys. Rev. B* **65**, 245420 (2002). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.245420>.
- [15] Zhang, Y., Tan, Y.-W., Stormer, H. L. & Kim, P. Experimental observation of the quantum hall effect and berry phase’s in graphene. *Nature* **438** (2005).
- [16] Novoselov, K. S. *et al.* Room-temperature quantum hall effect in graphene. *Science* **315**, 1379 (2007). URL <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0702408>.
- [17] Lui, C. H., Liu, L., Mak, K. F., Flynn, G. W. & Heinz, T. F. Ultraflat graphene. *Nature* **462**, 339 (2009).
- [18] Gusynin, V. P., Sharapov, S. G. & Carbote, J. P. Ac conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1 dimensional quantum electrodynamics. *International Journal of Modern Physics B* **21**, 4611–4658 (2007). URL <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979207038022>.
- [19] Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M., Novoselov, K. S. & Geim, A. K. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162 (2009). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>.
- [20] Ando, T. Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes. *Journal of the Physical Society of Japan* **74**, 777–817 (2005). URL <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.74.777>. <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.74.777>.
- [21] Bena, C. & Montambaux, G. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics* **11**, 095003 (2009). URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/11/i=9/a=095003>.

- [22] Saito, R., Dresselhaus, G. & Dresselhaus, H. *Physical properties of carbon nanotubes* (Imperial College Press, Singapore, 1998).
- [23] Dietl, P. *Numerical Studies of Electronic Transport through Graphene Nanoribbons with Disorder*. Sustentado (2009).
- [24] Wallace, P. R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.* **71**, 622–634 (1947). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>.
- [25] Li, G. & Andrei, E. Y. Observation of landau levels of dirac fermions in graphite. *Nature Phys.* **3**, 623–627 (2007).
- [26] Peierls, R. Zur theorie des diamagnetismus von leitungselektronen. *Zeitschrift für Physik* **80**, 763–791 (1933). URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF01342591>.
- [27] Brey, L. & Fertig, H. A. Edge states and the quantized hall effect in graphene. *Phys. Rev. B* **73**, 195408 (2006). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.195408>.
- [28] Hofstadter, D. R. Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields. *Phys. Rev. B* **14**, 2239–2249 (1976). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.14.2239>.
- [29] Osadchy, D. & Avron, J. E. Hofstadter butterfly as quantum phase diagram. *J. Math. Phys.* **42**, 12 (2001).
- [30] Guinea, F., Neto, A. H. C. & Peres, N. M. R. Electronic states and landau levels in graphene stacks. *Phys. Rev. B* **73**, 245426 (2006). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.245426>.
- [31] Gosselin, P., Boumrar, H. & Mohrbach, H. Semiclassical quantization of electrons in magnetic fields: The generalized peierls substitution. *EPL (Europhysics Letters)* **84**, 50002 (2008). URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/84/i=5/a=50002>.
- [32] Nemec, N. & Cuniberti, G. Hofstadter butterflies of bilayer graphene. *Phys. Rev. B* **75**, 201404 (2007). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.201404>.
- [33] Guilleminot, J. P., Helffer, B. & Treton, P. Walk inside hofstadter’s butterfly. *J. Phys. France* **50**, 2019–2058 (1989).

- [34] Iye, Y., Kuramochi, E., Hara, M., Endo, A. & Katsumoto, S. Hofstadter butterflies in a modulated magnetic field: Superconducting wire network with magnetic decoration. *Phys. Rev. B* **70** (2004).
- [35] Wakabayashi, K., Fujita, M., Ajiki, H. & Sigrist, M. Electronic and magnetic properties of nanographite ribbons. *Phys. Rev. B* **59**, 8271–8282 (1999). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.8271>.
- [36] Islamoğlu, S., Oktel, M. O. & Gülseren, O. The integer quantum hall effect of a square lattice with an array of point defects. *J. Phys. Condens. Matter.* **24**, 345501 (2012).
- [37] Rammal, R. Landau level spectrum of bloch electrons in a honeycomb lattice. *J. Physique* **46**, 1345–1354 (1985).
- [38] Iye, Y., Kuramochi, E., Hara, M., Endo, A. & Katsumoto, S. Superconducting network with magnetic decoration - hofstadter butterfly in spatially modulated magnetic field. *Proceedings of MS+S2004* (2004). URL <http://iye.issp.u-tokyo.ac.jp/publist/iyekats/iyekats0087.pdf>.
- [39] Capel, H. W. On the broadening of landau levels. *Physica* **54**, 361 – 384 (1971). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031891471901832>.
- [40] Datta, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, New York, 1999).
- [41] Büttiker, M., Imry, Y., Landauer, R. & Pinhas, S. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Phys. Rev. B* **31**, 6207–6215 (1985). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.31.6207>.
- [42] Paulsson, M. Non equilibrium green’s functions for dummies: Introduction to the one particle negf equations. *ArXiv* (2006). URL <http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0210519v2.pdf>.
- [43] Torre, G. M. M. L. *Espectroscopia de Tunelamento em Sistemas Nanoscopicos de Transporte Balistico*. Ph.D. thesis, UNICAMP (2003).
- [44] Paulson, M. & Brandbyge, M. Transmission eigenchannels from non-equilibrium green’s functions. *Phys. Rev. B* **76** (2007). URL <http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0702295.pdf>.

- [45] Fisher, D. S. & Lee, P. A. Relation between conductivity and transmission matrix. *Phys. Rev. B* **23**, 6851–6854 (1981). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.6851>.
- [46] Datta, S. *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press, New York, 2005).
- [47] Rivera, P. H. *Efectos de Campos Intensos sobre la Estructura Electrónica de Nanoestructuras*. Sustentado (2002).
- [48] Zahid, F., Paulsson, M. & Datta, S. *Advanced Semiconductors and Organic Nano-Technique*, chap. Electrical Conduction through Molecules (Academic Press, 2002), hadis morkoc edn.
- [49] Metalidis, G. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (2007). URL <http://books.google.com.pe/books?id=aE7hygAACAAJ>.
- [50] Sancho, M. P. L., Sancho, J. M. L. & Rubio, J. Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to mo(100). *J. Phys. F:Met. Phys.* **14** (1984).
- [51] Sancho, M. P. L., Sancho, J. M. L. & Rubio, J. Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface green-functions. *J. Phys. F:Met. Phys.* **15** (1985).
- [52] Li, T. C. & Lu, S.-P. Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects. *Phys. Rev. B* **77**, 085408 (2008). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.085408>.
- [53] Büttiker, M. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761–1764 (1986). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.57.1761>.
- [54] Buttiker, M. Symmetry of electrical conduction. *IBM Journal of Research and Development* **32**, 317–334 (1988).
- [55] Jayasekera, T. & Mintmire, J. W. Transport in multiterminal graphene nanodevices. *Nanotechnology* **18**, 424033 (2007). URL <http://stacks.iop.org/0957-4484/18/i=42/a=424033>.
- [56] Aslla, A. P., Montalvo, R. A. & Rivera, P. H. Revisitando la programación en paralelo. *Rev. Inv. de Física UNMSM* **14**, 111401851 (2011).

- [57] Thorgilsson, G., Viktorsson, G. & Erlingsson, S. Recursive green's function method for multi-terminal nanostructures. *Journal of Computational Physics* **261**, 256 – 266 (2014). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999114000096>.
- [58] Koskinen, P., Malola, S. & Häkkinen, H. Evidence for graphene edges beyond zigzag and armchair. *Phys. Rev. B* **80**, 073401 (2009). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.073401>.
- [59] Brey, L. & Fertig, H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.235411>.
- [60] Lee, D. H. & Joannopoulos, J. D. Simple scheme for surface-band calculations i. *Phys. Rev. B* **23**, 4988–4996 (1981). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.4988>.
- [61] Lee, D. H. & Joannopoulos, J. D. Simple scheme for surface-band calculations. ii. the green's function. *Phys. Rev. B* **23**, 4997–5004 (1981). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.4997>.
- [62] Dubois, S. M.-M., Zanolli, Z., Declerk, X. & Charlier, J.-C. Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures. *The European Physical Journal B* **72**, 1–24 (2009). URL <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2009-00327-8>.
- [63] Wakabayashi, K., Takane, Y., Yamamoto, M. & Sigrist, M. Electronic transport properties of graphene nanoribbons. *New Journal of Physics* **11**, 095016 (2009). URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/11/i=9/a=095016>.
- [64] Peres, N. M. R., Neto, A. H. C. & Guinea, F. Conductance quantization in mesoscopic graphene. *Phys. Rev. B* **73**, 195411 (2006). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.195411>.
- [65] Huang, L., Lai, Y.-C., Ferry, D. K., Akis, R. & Goodnick, S. M. Transmission and scarring in graphene quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 344203 (2009). URL <http://stacks.iop.org/0953-8984/21/i=34/a=344203>.
- [66] Dekker, C. Solid-state nanopores. *Nat. Nano* **2**, 209–215 (2007). URL <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2007.27>.

- [67] Branton, D. *et al.* The potential and challenges of nanopore sequencing. *Nat Biotech* **26**, 1146–1153 (2008). URL <http://dx.doi.org/10.1038/nbt.1495>.
- [68] Schneider, G. F. *et al.* Dna translocation through graphene nanopores. *Nano Letters* **10**, 3163–3167 (2010). URL <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nl102069z>. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/nl102069z>.
- [69] Li, J., Gershow, M., Stein, D., Brandin, E. & Golovchenko, J. A. Dna molecules and configurations in a solid-state nanopore microscope. *Nat Mater* **2**, 611–615 (2003). URL <http://dx.doi.org/10.1038/nmat965>.
- [70] Storm, A. J. *et al.* Fast dna translocation through a solid-state nanopore. *Nano Letters* **5**, 1193–1197 (2005). URL <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nl048030d>. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/nl048030d>.
- [71] Kowalczyk, S. W., Hall, A. R. & Dekker, C. Detection of local protein structures along dna using solid-state nanopores. *Nano Letters* **10**, 324–328 (2010). URL <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nl903631m>. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/nl903631m>.
- [72] Schneider, G. F. & Dekker, C. Dna sequencing with nanopores. *Nature Biotechnology* **4**, 326–328 (2012).
- [73] Klotsa, D., Römer, R. A. & Turner, M. S. Electronic transport in dna. *Biophysical Journal* **89**, 2187–98 (2005).
- [74] Wells, S. A., Shih, C.-T. & Römer, R. A. Modeling charge transport in dna using transfer matrices with diagonal terms. *Int. Jour. of Mod. Phys B* **10** (2008).
- [75] Paez, C. J., Schulz, P. A., Wilson, N. R. & Römer, R. A. Robust signatures in the current-voltage characteristics of dna molecules oriented between two graphene nanoribbon electrodes. *New. Journal of Physics* **14**, 093049 (2012).
- [76] Qi, J., Edirisinghe, N., Rabbani, M. G. & Anantram, M. P. Unified model for conductance through dna with the landauer-buttiker formalism. *Phys. Rev. B* **87** (2013).
- [77] Saha, K. K., Drndić, M. & Nikolić, B. K. Robust signatures in the current-voltage characteristics of dna molecules oriented between two graphene nanoribbon electrodes. *Nano Lett.* **12**, 50–55 (2012).
- [78] Alberts, B. *et al.* *Molecular Biology of the Cell* (Garland Science, New York, 2008), quinta edn.

- [79] Metalidis, G. & Bruno, P. Green's function technique for studying electron flow in two-dimensional mesoscopic samples. *Phys. Rev. B* **72**, 235304 (2005). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.235304>.
- [80] Ferry, D. K., Goodnick, S. M. & Bird, J. *Transport in Nanostructures* (Cambridge, New York, 2009).
- [81] Sigalov, G., Comer, J., Timp, G. & Aksimentiev, A. Detection of dna sequences using an alternating electric field in a nanopore capacitor. *Nano. Lett.* **8**, 56–63 (2008).
- [82] Kasianowicz, J. J., Brandin, E., Branton, D. & Deamer, D. W. Characterization of individual polynucleotide molecules using a membrane channel. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **93**, 13770–13773 (1996).
- [83] Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development* **1**, 223–231 (1957).
- [84] Landauer, R. Electrical transport in open and closed systems. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **68**, 217–228 (1987). URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF01304229>.

Apéndice A

Relaciones importantes

En la sección 2.2 se utilizan matrices hamiltonianas H que permiten obtener la estructura de bandas, aquí derivamos explícitamente las expresiones de los elementos de matriz.

A.1. Elementos de matriz para el hamiltoniano del grafeno

En esta sección calculamos los elementos de la matriz hamiltoniana H dada en la ecuación (2.11) en la base $\{|\psi_k^A\rangle, |\psi_k^B\rangle\}$, dadas en (2.7), (2.8) y de acuerdo al hamiltoniano *tight-binding* (2.3), es decir el elemento de matriz $\langle\psi_k^A|H|\psi_k^A\rangle$ se obtiene como:

$$\begin{aligned}\langle\psi_k^A|H|\psi_k^A\rangle &= \sum_l e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l^A} \langle\phi_l^A| \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle} (|\phi_j^A\rangle\langle\phi_i^B| + |\phi_j^B\rangle\langle\phi_i^A|) \right) \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m^A} |\phi_m^A\rangle \\ &= \sum_l e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l^A} \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle} (\langle\phi_l^A|\phi_j^A\rangle\langle\phi_i^B| + \langle\phi_l^A|\phi_j^B\rangle\langle\phi_i^A|) \right) \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m^A} |\phi_m^A\rangle \\ &= \sum_l e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l^A} \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{lj} \langle\phi_i^B| \right) \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m^A} |\phi_m^A\rangle \\ &= -t \sum_l e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l^A} \sum_{\langle i \rangle} \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m^A} \langle\phi_i^B|\phi_m^A\rangle = 0\end{aligned}$$

$$\langle \psi_k^A | H | \psi_k^A \rangle = 0 \quad (\text{A.1})$$

de manera similar se encuentra

$$\langle \psi_k^B | H | \psi_k^B \rangle = 0. \quad (\text{A.2})$$

Calculando ahora el elemento de matriz $\langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle$ tenemos

$$\begin{aligned} \langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle &= \sum_l e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} \langle \phi_l^A | \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle} (|\phi_j^A\rangle \langle \phi_i^B| + |\phi_j^B\rangle \langle \phi_i^A|) \right) \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m^B} |\phi_m^B\rangle \\ &= \sum_l e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle} (\langle \phi_l^A | \phi_j^A \rangle \langle \phi_i^B | + \langle \phi_l^A | \phi_j^B \rangle \langle \phi_i^A |) \right) \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m^B} |\phi_m^B\rangle \\ &= \sum_l e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{lj} \langle \phi_i^B | \right) \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m^B} |\phi_m^B\rangle \\ &= -t \sum_l e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} \sum_{\langle i \rangle} \delta_{il} \langle \phi_i^B | \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m^B} |\phi_m^B\rangle \\ &= -t \sum_l e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} \sum_{\langle i \rangle} \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m^B} \langle \phi_i^B | \phi_m^B \rangle \\ &= -t \sum_l e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} \sum_{\langle i \rangle} \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m^B} \delta_{im} \\ &= -t \sum_l e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} \sum_{\langle i \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i^B} \\ &= -t \sum_l \sum_{\langle i \rangle} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l^A} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i^B} \\ &= -t \sum_l \sum_{\langle i \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i^B - \mathbf{R}_l^A)} \end{aligned}$$

donde $\mathbf{R}_i^B - \mathbf{R}_l^A$ representa la posición relativa de los átomos de la red B respecto a las posiciones de los átomos A .

Para un solo átomo A tenemos que las posiciones relativas de los primeros vecinos son $\mathbf{R}_i^B - \mathbf{R}_l^A = \vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2, \vec{\delta}_3$, de modo que

$$\begin{aligned} \langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle &= -t \sum_{\langle i \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i^B - \mathbf{R}_l^A)} = -t \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_3} \right) \\ \langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle &= -tf(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

con $f(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_3}$.

Por otro lado

$$\begin{aligned} \langle \psi_k^B | H | \psi_k^A \rangle &= \langle \psi_k^A | H | \psi_k^B \rangle^* \\ &= \left(-t \sum_l \sum_{\langle i \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l^B - \mathbf{R}_i^A)} \right)^* \\ &= -t \sum_l \sum_{\langle i \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i^A - \mathbf{R}_l^B)} \end{aligned}$$

para un solo átomo B las posiciones relativas de los primeros vecinos son $\mathbf{R}_i^A - \mathbf{R}^B = -\vec{\delta}_1, -\vec{\delta}_2, -\vec{\delta}_3$, entonces

$$\langle \psi_k^B | H | \psi_k^A \rangle = -t \sum_{\langle i \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i^A - \mathbf{R}^B)} = -t \left(e^{i\mathbf{k} \cdot (-\vec{\delta}_1)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (-\vec{\delta}_2)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (-\vec{\delta}_3)} \right)$$

$$\langle \psi_k^B | H | \psi_k^A \rangle = -t \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_3} \right) = -t f^*(\mathbf{k}) \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo los resultados (A.1), (A.2), (A.3) y (A.4) en la ecuación (2.11), la expresión matricial de H es

$$H = -t \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

A.2. Relación de dispersión $|f(\mathbf{k})|$

Evaluamos la relación de dispersión $|f(\mathbf{k})|$ teniendo en cuenta que $f(\mathbf{k})$ es dado como $f(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_3}$ es decir

$$\begin{aligned} |f(\mathbf{k})|^2 &= f^*(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) \\ |f(\mathbf{k})|^2 &= (e^{-i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_3}) (e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_3}) \\ &= 3 + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_1)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_3 - \vec{\delta}_1)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_3 - \vec{\delta}_2)} \\ &= 3 + e^{i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3)} \\ &= 3 + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2)) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3)) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot (\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2 &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{1}{2}a\hat{y} \right) - \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{1}{2}a\hat{y} \right) = -\sqrt{3}a\hat{x} \\
\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3 &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{1}{2}a\hat{y} \right) - a\hat{y} = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{3}{2}a\hat{y} \\
\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3 &= \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{1}{2}a\hat{y} \right) - a\hat{y} = \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{3}{2}a\hat{y}
\end{aligned}$$

como $\cos(-\theta) = \cos \theta$ paridad de la función $\cos \theta$

$$|f(\mathbf{k})|^2 = 3 + 2 \cos \left(\sqrt{3}k_x a \right) + 2 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a + \frac{3}{2}k_y a \right) + 2 \cos \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a + \frac{3}{2}k_y a \right)$$

usando $\cos(\phi \pm \theta) = \cos \phi \cos \theta \mp \sin \phi \sin \theta$

$$\begin{aligned}
\cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a + \frac{3}{2}k_y a \right) &= \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \cos \left(\frac{3}{2}k_y a \right) - \sin \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \sin \left(\frac{3}{2}k_y a \right) \\
\cos \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a + \frac{3}{2}k_y a \right) &= \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \cos \left(\frac{3}{2}k_y a \right) + \sin \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \sin \left(\frac{3}{2}k_y a \right)
\end{aligned}$$

entonces

$$\cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a + \frac{3}{2}k_y a \right) + \cos \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a + \frac{3}{2}k_y a \right) = 2 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \cos \left(\frac{3}{2}k_y a \right)$$

$$|f(\mathbf{k})|^2 = 3 + 2 \cos \left(\sqrt{3}k_x a \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \cos \left(\frac{3}{2}k_y a \right) \quad (\text{A.6})$$

si $\cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) = \frac{1}{2} (1 + \cos 2\theta)$ entonces $\cos 2\theta = 2 \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - 1$

$$\cos \left(\sqrt{3}k_x a \right) = 2 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) - 1 \quad (\text{A.7})$$

$$|f(\mathbf{k})|^2 = 1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \cos \left(\frac{3}{2}k_y a \right) \quad (\text{A.8})$$

de donde

$$|f(\mathbf{k})| = \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right) \cos \left(\frac{3}{2}k_y a \right) + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a \right)} \quad (\text{A.9})$$